

**Untersuchungen
zur Ionenstrahlsynthese
vergrabener metallischer Schichten
durch MeV Ni-Implantation
in Silizium**

DISSERTATION
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
der Abteilung Physik der Universität Dortmund

vorgelegt von
JÖRG K. N. LINDNER

1989

Referent : Prof. Dr. E. H. te Kaat

Koreferent : Prof. Dr. O. Kanert

Tag der mündlichen Prüfung : 09.10.1989

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	1
2. Ionenimplantation	4
2.1 Abbremsung	4
2.2 Monte-Carlo-Simulation	7
2.3 Strahlenschädigung	9
2.3.1 Grundlegende Modelle	9
2.3.2 Erzeugung und Relaxation von "energy-spikes"	11
2.3.3 Strahlenschädigung durch Siliziumeigen- implantation	12
2.3.4 Strahlenschädigungsmodell nach Hecking et al.	15
3. Metall-Silizium Verbindungen	17
3.1 Übergangsmetallsilizide	17
3.2 Das Nickel-Silizium System	19
3.3 Epitaxie von NiSi_2 auf Silizium	24
4. Untersuchungsmethoden	28
4.1 Messung der optischen Reflektivitätsänderung	28
4.1.1 Meßprinzip	28
4.1.2 Interpretation von Tiefenprofilen der optischen Reflektivitätsänderung	29
4.2 Messung des Ausbreitungswiderstandes	34
4.3 Auger-Elektronenspektroskopie	38
4.4 Transmissionselektronenmikroskopie (TEM)	40
4.4.1 Elektronenbeugung	40
4.4.2 Abbildungsverfahren und Kontraste	45
5. Probenherstellung und Probenpräparation	47
5.1 Implantation	47
5.2 Tempern	49
5.3 Präparation	50

6. Ergebnisse und Diskussion	54
6.1 Einfluß von Nickel auf die optische Reflektivität	54
6.2 Der implantierte Zustand	56
6.2.1 Tiefenverteilung von Strahlenschäden	56
6.2.2 Dosis- und Temperaturabhängigkeit der Schädigung in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft	60
6.2.3 Defektausbeute im Bereich dosisproportionaler Schädigung	62
6.2.4 Temperaturabhängigkeit der Modellparameter für Defektproduktion und Defektwechselwirkung	65
6.2.5 Temperaturabhängigkeit der Amorphisierungsdosis	72
6.2.6 Bildung ausgedehnter Defekte bei 450 K	74
6.2.7 Vorübergehende Amorphisierung bei 450 K	84
6.2.8 Einfluß von Strahlenschäden auf die Bildung von NiSi ₂ -Ausscheidungen	95
6.2.9 Charakterisierung von NiSi ₂ -Ausscheidungen und ihrer Tiefenverteilung bei 450 K- Implantationen	98
6.2.10 Änderung des Ausbreitungswiderstandes	126
6.3 Der Zustand nach Temperbehandlung	131
7. Zusammenfassung	150
Anhang	153
A Strukturfaktoren	153
B Richtungstransformation in Typ-B NiSi ₂	154
C Überlagerung von Beugungsmustern	155
D Aufspaltung von Beugungsreflexen	158
E Tiefenskalen	158
Literaturverzeichnis	160

1. Einleitung

Die Ionenimplantation findet heute weite Anwendung bei der Herstellung von Halbleiterbauelementen. Hierbei werden zur Dotierung von Silizium beispielsweise meist Ionenenergien bis zu einigen hundert keV und Dosen unterhalb 10^{15} cm^{-2} benötigt. Gegenwärtig zeigt sich ein wachsendes Interesse an Implantationen mit höheren Energien /1-4/ oder höheren Dosen /5-9/.

Durch Ionenbestrahlung bei Energien von einigen MeV können gezielt Materialeigenschaften in einer Tiefe von wenigen μm unter der Oberfläche verändert werden. Da in zwei Dimensionen integrierte Bauelemente im Zuge der fortschreitenden Hochintegration zunehmend flachere Schichtstrukturen benötigen, lassen sich durch MeV-Implantationen Zonen direkt unterhalb der aktiven Bauelementschichten erreichen. Verschiedene sich daraus ergebende Anwendungsbeispiele werden in /1-4/ genannt. Auch im Hinblick auf die für zukünftige Bauelementgenerationen angestrebte dreidimensionale Integration bietet die Hochenergieimplantation wichtige Anwendungsmöglichkeiten, so z.B. bei der Herstellung vertikaler Transistoren /10/.

Das Interesse an Hochdosisimplantationen beruht auf der Möglichkeit, vergrabene Schichten zu erzeugen, in denen die implantierten Fremdatome eine stöchiometrische Verbindung mit dem Targetmaterial eingehen.

Vor allem die Ionenstrahlsynthese vergrabener SiO_2 - und Si_3N_4 -Schichten wurde in den letzten Jahren intensiv untersucht (Überblick in /5-7/), da in der über diesen Isolationsschichten liegenden Siliziumdeckschicht eine erhöhte Packungsdichte von Halbleiterbauelementen erreicht werden kann. Während sich die meisten Arbeiten mit Implantationen im keV-Energiebereich beschäftigen, findet man zunehmend auch Untersuchungen für Energien von einigen MeV /11-14/.

Ein weiteres Beispiel ist der Halbleiter SiC, der mit Hilfe anderer Verfahren wegen der erforderlichen Reinheit nur schwierig herzustellen ist /15/. Bei der Ionenstrahlsynthese /15/ ist die nötige Reinheit durch die Verwendung eines massenselektierten Strahls gegeben, sofern die Verbindungsbildung hinreichend weit innerhalb des Siliziumwafers erfolgt.

Silizium geht mit einer Vielzahl von chemischen Elementen stabile Verbindungen ein. Es stellt sich somit die Frage, ob durch Hochdosisimplantation neben SiC, SiO₂ und Si₃N₄ auch andere Siliziumverbindungen in Form einer vergrabenen Schicht erzeugt werden können.

Wegen des in der 3d-Integration ungelösten Problems der Herstellung vergrabener Kontaktierungen /10/ sind Untersuchungen zur Ionenstrahlsynthese vergrabener leitfähiger Verbindungen wünschenswert. Hierbei bieten sich die gut leitenden Siliziumverbindungen der Übergangsmetalle an. Unter ihnen sind die siliziumreichen Silizide NiSi₂ und CoSi₂ auch von grundlegendem Interesse. Die strukturelle Ähnlichkeit von NiSi₂ und Silizium bei nahezu gleichen Gitterkonstanten ($\Delta a/a \approx 0.4\%$) ermöglicht die Bildung einer epitaktischen metallischen Schicht auf Silizium /16/. Gute epitaktische Verhältnisse bestehen auch zwischen CoSi₂ und Silizium.

Zur Bildung von NiSi₂ und anderen Siliziden durch Hochdosisimplantation liegt inzwischen eine Reihe von Untersuchungen für den keV-Energiebereich vor. Wegen der bei hinreichend hohen Dosen merklichen Sputtererosion der Oberfläche erhält man in der Regel metallische Schichten an der Probenoberfläche, die sich oft aus verschiedenen Silizidphasen zusammensetzen und deren Bildung schwer zu interpretieren ist (z.B. /17-22/). Das Problem der Sputtererosion der Oberfläche läßt sich durch Implantation bei hohen Targettemperaturen begrenzen /23/. Dies hat in den letzten zwei Jahren zu zahlreichen Untersuchungen der Ionenstrahlsynthese vergrabener Metallsilizidschichten geführt. Die bisher erschienenen Veröffentlichungen /23-35/ befassen sich vor allem mit CoSi₂-Schichten und hier hauptsächlich mit dem Zustand nach verschiedenen Temperbehandlungen.

In dieser Arbeit werden Untersuchungen zur Ionenstrahlsynthese vergrabener metallischer Schichten durch 6 MeV ⁵⁸Ni-Implantation in Silizium vorgestellt.

Die hohe Energie führt zu tiefen und breiten Implantationsprofilen, so daß die Veränderungen des Targets bei hoher relativer Tiefenauflösung untersucht werden können. Darüberhinaus werden Probleme aufgrund der Sputtererosion und der nahen Oberfläche vermieden.

Voraussetzung für ein Verständnis der bei Hochdosisimplantationen in einem sich kontinuierlich verändernden Target auftretenden Prozesse sind hinreichende Kenntnisse über das Ionenprofil sowie die Strahlenschädigung

im Bereich kleinerer Dosen. Daher wird zunächst detailliert die Dosis- und Temperaturabhängigkeit der Schädigung durch 6 MeV ^{58}Ni -Ionenbeschuß bei kleineren Dosen optisch und elektronenmikroskopisch untersucht. Es zeigt sich, daß bei hohen Dosen und Targettemperaturen das Schädigungsverhalten merklich durch die deponierten Ni-Atome beeinflusst wird. Gleichzeitig erhält man eine durch die vorliegende Strahlenschädigung veränderte Nickelverteilung.

Die Bildung von Silizidausscheidungen wird im weiteren Verlauf der Arbeit elektronenmikroskopisch analysiert. Die Größe der Ausscheidungen und ihre Orientierungsbeziehung zur umgebenden Siliziummatrix werden in Abhängigkeit von der Implantationsdosis tiefen aufgelöst bestimmt. Zur Interpretation des beobachteten Ausscheidungsverhaltens werden Keimbildung und Wachstum näher betrachtet.

Die mit zunehmender Dosis fortschreitende Veränderung der elektrischen Eigenschaften wird durch tiefen aufgelöste Messungen des Ausbreitungswiderstandes untersucht.

Im letzten Teil der Arbeit wird der Zustand von Hochdosisimplantaten nach einer Temperbehandlung optisch, elektrisch und elektronenmikroskopisch charakterisiert. Die sich beim Tempern bildende Schichtstruktur wird deutlich durch die nach der Implantation vorliegende Ausscheidungsverteilung beeinflusst. Bei genügend hohen Dosen erhält man eine tief vergrabene, homogene Silizidschicht hoher elektrischer Leitfähigkeit.

2. Ionenimplantation

2.1 Abbremsung

Ionen unterliegen bei ihrer Bewegung durch einen Festkörper im wesentlichen der Coulombwechselwirkung mit dessen Atomkernen und Elektronen. Eine detaillierte Beschreibung der auftretenden Prozesse geben Ziegler, Biersack und Littmark /36/, eine Einführung findet sich in /37/. Zur Beschreibung der Abbremsung ist eine Betrachtung des interatomaren Potentials zwischen dem Projektil und den Targetatomen notwendig.

Bei Energien oberhalb von etwa 20 MeV/amu bewegt sich ein Ion schneller als die Elektronen seiner K-Schale und ist daher mit hoher Wahrscheinlichkeit vollständig ionisiert. Die hier vornehmlich durch die Wechselwirkung mit den Targetelektronen hervorgerufene Abbremsung wird für nicht-relativistische Energien durch die Bethe-Bloch-Theorie /38,39/ beschrieben.

Mit abnehmender Geschwindigkeit kann ein Projektil im Festkörper Elektronen aufnehmen. Die in dem als Übergangsbereich bezeichneten Energieintervall durchlaufenen dynamischen Ladungszustände werden durch eine effektive Ladung charakterisiert (Abb 2.1), die Werte zwischen null und der Kernladungszahl des Projektils annehmen kann /40/. Die elektronische Abbremsung im Übergangsbereich wird für einige Ionensorten mit Hilfe von Fitformeln beschrieben /z.B. 41,42/.

Eine über den Übergangsbereich hinaus gültige mathematische Formulierung der Abbremsung auf semiempirischer Grundlage gibt Ziegler /40/.

Bei hinreichend kleinen Teilchengeschwindigkeiten bewegt sich das Projektil im Target als weitgehend neutrales Atom (Abb. 2.1). Zur Beschreibung der Abbremsung bei Energien unterhalb 0.1 MeV/amu (≈ 6 MeV für ^{58}Ni -Ionen) wurde bisher meist die nach Lindhard, Scharff und Schiøtt benannte LSS-Theorie /43/ herangezogen. Danach ist die elektronische Bremskraft S_e proportional zur Projektilgeschwindigkeit bzw. der Wurzel der Teilchenenergie E und proportional zur Targetdichte N :

$$S_e = - \left. \frac{dE}{dx} \right|_e = N k_{LSS} E^{1/2} \quad (2.1)$$

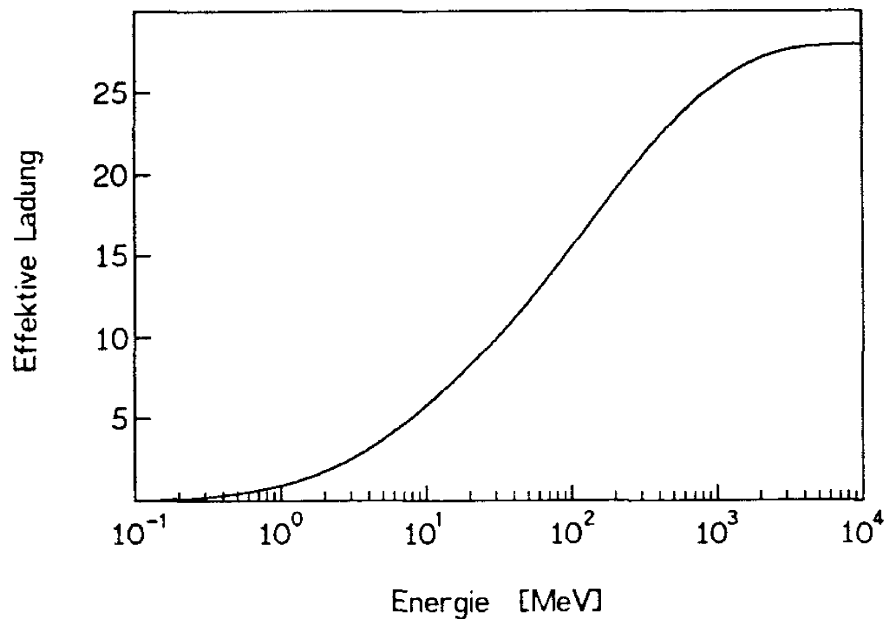


Abb. 2.1

Energieabhängigkeit der effektiven Ladung von ^{58}Ni -Ionen (nach /40/).

Der k_{LSS} -Koeffizient ist eine Funktion der Kernladungszahlen von Ion und Target sowie der Projektilmasse. Die Vernachlässigung von Schalen-effekten in der LSS-Theorie führt zu Ungenauigkeiten von bis zu 50 %. Verbesserungen liefert eine neuere Theorie von Ziegler, Biersack und Littmark (ZBL-Theorie /36/).

Bei den nun betrachteten Energien erfolgt die Abbremsung außer durch die inelastische Wechselwirkung mit Targetelektronen wesentlich auch durch elastische Zweierstöße mit den Targetkernen. Beide Prozesse werden als unabhängig angesehen und getrennt behandelt. Die Gesamtbremskraft S setzt sich somit aus dem elektronischen Anteil S_e und einem nuklearen Anteil S_n zusammen:

$$S = S_e + S_n = - \left. \frac{dE}{dx} \right|_e - \left. \frac{dE}{dx} \right|_n \quad (2.2)$$

Zur Berechnung der nuklearen Bremskraft geben Lindhard, Scharff und Schiøtt /43/ auf der Grundlage des statistischen Thomas-Fermi-Atommodells einen differentiellen Streuquerschnitt in tabellierter Form an.

Aus diesem kann eine universal für alle Ion-Targetkombinationen gültige Bremskraft in reduzierten Energie- und Weglängeneinheiten abgeleitet werden. Ein wichtiger analytischer Ausdruck für den LSS-Streuquerschnitt wird von Winterbon, Sigmund und Sanders /44/ ermittelt.

Eine genauere Beschreibung auch für die nukleare Bremskraft gelingt mit Hilfe der neueren ZBL-Theorie /36/. Nach Berechnung von Potentialen für eine große Anzahl von Ion-Targetkombinationen wird durch Anpassung das sogenannte "universal potential" bestimmt, das sich gegenüber dem Thomas-Fermi-Potential in der LSS-Theorie durch eine genauere Coulombabschirmung auszeichnet. Eine für Simulationsrechnungen (s. Kap. 2.2) wichtige Fitformel für den hieraus nur numerisch bestimmbar ZBL-Streuquerschnitt geben Kang, Kawatoh und Shimizu /45/. Für die direkt aus dem "universal potential" berechenbaren Bremskräfte geben Ziegler et al. Approximationsgleichungen /46/ an, mit Hilfe derer sich die nukleare Bremskraft "in den meisten Fällen" mit einer Genauigkeit von besser als 10 % bestimmen läßt.

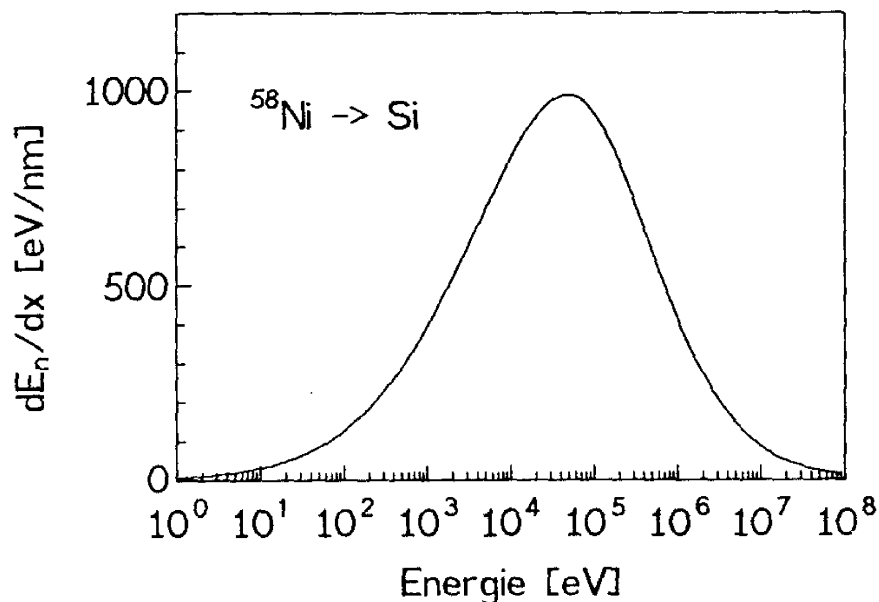


Abb. 2.2

Energieabhängigkeit der nuklearen Bremskraft von ^{58}Ni -Ionen in Silizium (nach /46/).

Abb. 2.2 zeigt die danach berechnete nukleare Bremskraft von ^{58}Ni -Ionen in Silizium. Bereits bei Energien von einigen MeV erfahren die Projektile einen deutlichen Energieverlust durch Kernstöße. Anders als die elektronische Bremskraft, die in diesem Bereich mit abnehmender Energie monoton fällt, wächst die nukleare Bremskraft zunächst an und durchläuft ein Maximum von etwa 980 eV/nm bei einer Energie von ca. 60 keV.

2.2 Monte-Carlo-Simulation

Tiefenprofile der elektronischen und der nuklearen Bremskraft sowie der abgelagerten Ionen lassen sich mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen berechnen.

Das häufig verwendete, auf der ZBL-Theorie basierende Simulationsprogramm TRIM /36/ ermöglicht Berechnungen für strukturlose Targets, die aus bis zu drei homogenen Schichten vorzugegebender konstanter Dichte bestehen (statische Simulation).

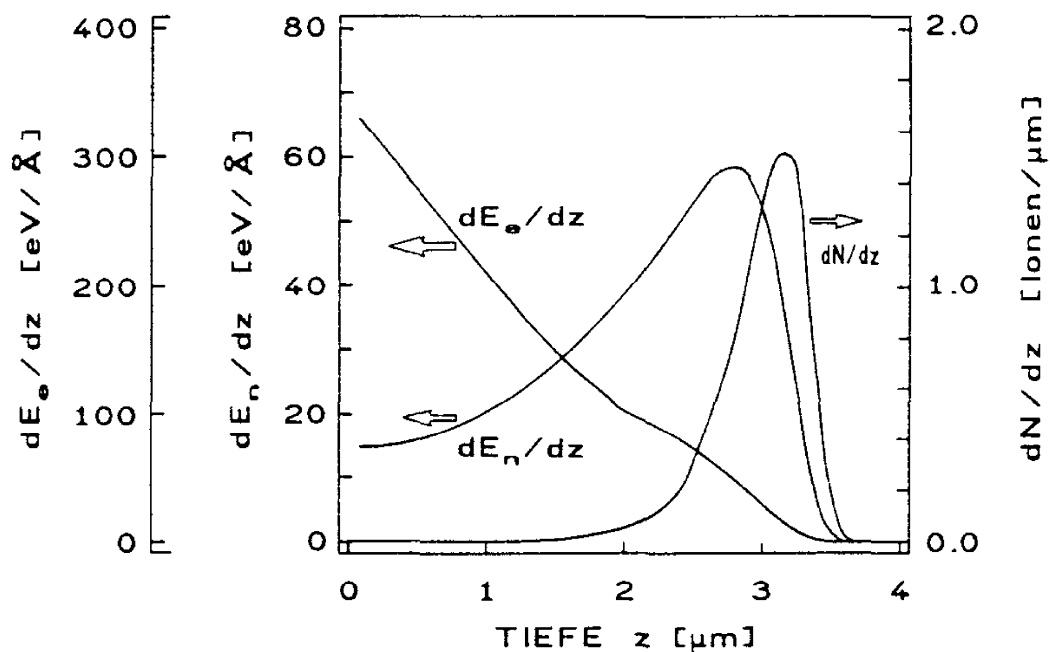


Abb. 2.3

Mit TRIM /36/ berechnete Ionenverteilung sowie Tiefenprofile der elektronischen und nuklearen Abbremsung für die 6 MeV ^{58}Ni -Implantation in Silizium.

Mit TRIM berechnete Ionen- und Bremskraftprofile sind in Abb. 2.3 für den Fall der 6 MeV ^{58}Ni -Implantation in Silizium dargestellt. Nahe der Oberfläche überwiegt der elektronische Energieverlust erheblich gegenüber der nuklearen Bremskraft. Während die elektronische Bremskraft mit zunehmender Tiefe abnimmt, durchläuft der mittlere nukleare Energieverlust ein Maximum von 58 eV/\AA in einer Tiefe von $2.82 \mu\text{m}$. Das Maximum der Ionenverteilung befindet sich gemäß der Simulation $3.16 \mu\text{m}$ tief unter der Substratoberfläche.

Abb. 2.4 zeigt auf der Grundlage des TRIM-Programms simulierte räumliche Ionenspuren /47/ für 6 MeV ^{58}Ni -Ionen in Silizium. Die mit abnehmender Energie wahrscheinlicher werdenden nuklearen Stöße mit starker Impulsänderung führen zu größeren Streuwinkeln mit zunehmender Tiefe.

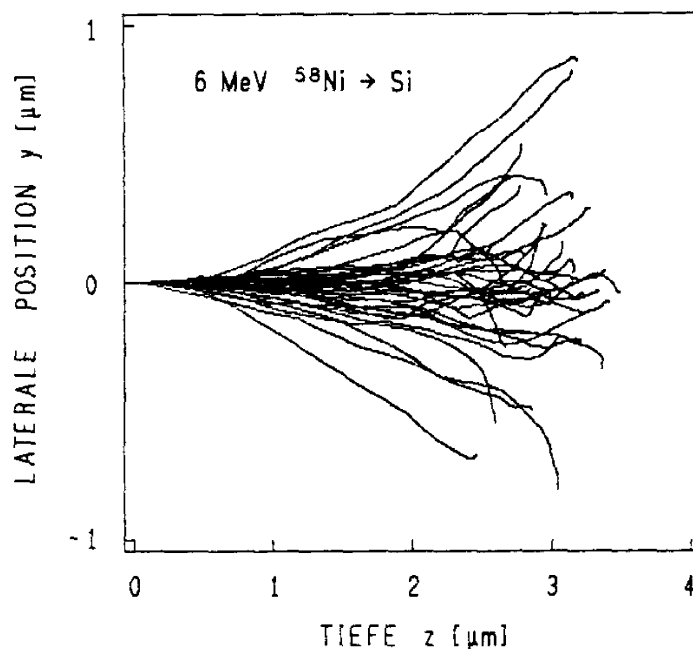


Abb. 2.4

Auf der Grundlage des TRIM-Programms simulierte Trajektorien /47/ von 38 mit einer Primärenergie von 6 MeV eingeschossenen ^{58}Ni -Ionen in Silizium.

Bei Hochdosisimplantationen können sich veränderte Bremskräfte und Ionenprofile beispielsweise dadurch ergeben, daß sich die Targetdichte und -zusammensetzung im Laufe der Bestrahlung verändern oder die Targetoberfläche sukzessive durch Sputtern abgetragen wird. Solchen dosisabhängigen Effekten trägt das Monte-Carlo-Simulationsprogramm

HIDOS /48-50/ Rechnung, in dem Kang-Streuquerschnitte (s. Kap. 2.1) für die nukleare und LSS-Bremskräfte für die elektronische Abbremsung benutzt werden. Im dynamischen Simulationsprogramm HIDOS wird nach jedem Teilchen die Targetzusammensetzung neu festgelegt, wobei ein Teilchen als repräsentativ für eine bestimmte Dosis angenommen wird.

2.3 Strahlenschädigung

2.3.1 Grundlegende Modelle

Ist die bei einem nuklearen Stoß auf ein Targetatom übertragene Energie hinreichend groß, so wird dieses von seinem Gitterplatz verlagert und hinterläßt eine Leerstelle. Die zur Erzeugung eines stabilen Frenkel-Paars in Silizium erforderliche Energie beträgt bei tiefen Temperaturen etwa 10-15 eV /51,52/.

In vielen Fällen erhalten die von einem Ion primär angestoßenen Target-(Recoil-) atome ausreichend hohe kinetische Energien, um ihrerseits weitere Targetatome von ihren Gitterplätzen zu verlagern, so daß sich entlang der Ionenspur innerhalb von etwa 10^{-13} sec eine Stoßkaskade ausbildet. Die Anzahl N der von einem einfallenden Ion hervorgerufenen Atomverlagerungen ist folglich eng korreliert zum Bruchteil $f(E)$ der in nuklearen Stößen deponierten Energie E. Im Rahmen des einfachen, auf der Annahme binärer Stöße basierenden Kinchin-Pease Modells /53/ ergibt sich

$$N(E) = \frac{0.42 f(E) E}{E_d} \quad . \quad (2.3)$$

Bei hinreichend kleinen Dosen entspricht das Tiefenprofil der Strahlenschädigung in etwa dem Verlauf des nuklearen Bremskraftprofils (z.B. /54/).

Ein Teil der innerhalb einer Stoßkaskade erzeugten Defekte ist in der Lage, sofort wieder auszuheilen. Die pro Ion erzeugte Schädigung und somit auch die zum Erreichen der Amorphisierung notwendige Dosis hängen daher wesentlich auch von der Targettemperatur ab.

Vook /55/ stellt durch Untersuchung zahlreicher experimenteller Daten für Implantationen im keV-Bereich fest, daß es für Temperaturen unterhalb 85 K eine kritische Energiedichte e_c von 6×10^{23} eV/cm³ gibt, die zum Eintreten der Amorphisierung deponiert werden muß. Dieser Wert wird in zahlreichen Untersuchungen (z.B. /56,57/) bestätigt. Somit läßt sich beispielsweise mit Hilfe simulierter Tiefenprofile der nuklearen Bremskraft die zur Amorphisierung in einer bestimmten Probentiefe bei kleinen Targettemperaturen notwendige kritische Dosis $D_{T \rightarrow 0}^*(z)$ abschätzen:

$$D_{T \rightarrow 0}^*(z) = e_c / S_n(z) \quad . \quad (2.4)$$

Hierbei wird vorausgesetzt, daß bei hinreichend kleinen Temperaturen keine Ausheilvorgänge stattfinden.

Morehead und Crowder /58/ beschreiben den experimentell zu beobachtenden Anstieg der kritischen Dosis D^* mit der Targettemperatur unter der Annahme, daß bei höheren Temperaturen ein Abbau des direkt geschädigten Volumens durch Leerstellendiffusion aus der Kaskade heraus und anschließende Rekombination stattfindet.

Zur Beschreibung des bei der Bestrahlung erzeugten amorphen Volumenanteils als Funktion der Dosis wurde eine Reihe von Modellen /59,60/ entwickelt, die auf dem "Überlappungsmodell" von Gibbons /52/ basieren. Hierin ist die Anzahl an Stoßkaskaden, die ein Gebiet erfassen müssen, damit Amorphisierung eintritt, ein freier Parameter, der an experimentelle Ergebnisse angepaßt wird. Man nimmt heute vielfach an /61-63/, daß die kristallin-amorphe Phasenumwandlung sowohl durch direkte Amorphisierung im Kern einer dichten Stoßkaskade als auch durch Überlappung mehrerer Kaskaden eintreten kann. Dabei wird der erste Prozeß eher schweren, der zweite mehr leichten Ionen zugeschrieben.

Obgleich die zitierten Modelle zum Teil /60/ auch temperaturabhängige Ausheilmechanismen berücksichtigen, ist hiermit eine zufriedenstellende quantitative Beschreibung der durch umfangreiche optische sowie elektronenmikroskopische Untersuchungen /64-71/ ermittelten Schädigung von Silizium nach 2 MeV Si-Ionenbeschuß nicht möglich /64/. Hecking et al. /72,73/ schlagen daher ein neues Modell für die Dosis- und Temperaturabhängigkeit der Schädigung vor, das auf sogenannten "spike"-Konzepten beruht. Die Idee des "energy-spikes", auf die auch andere neuere Schädigungsmodelle /62/ zurückgreifen, und das darauf aufbauende

Modell nach Hecking et al. werden im folgenden erläutert. Die mit diesem Modell in weiten Grenzen beschreibbare Temperatur- und Dosisabhängigkeit der Schädigung von Silizium nach 2 MeV Si-Implantation wird später (Kap. 6.2.3-6.2.6) mit entsprechenden Ergebnissen nach Hochenergie Ni-Ionenbeschuß verglichen.

Hinsichtlich weiterer Untersuchungen, die hauptsächlich für Primärenergien im keV-Bereich vorliegen, sei auf die umfangreiche Literatur (z.B. 74-76/) hingewiesen. Auch der für die Anwendung in der Mikroelektronik wichtige Defektzustand nach Temperbehandlungen wird dort ausführlich erläutert.

2.3.2 Erzeugung und Relaxation von "energy-spikes"

Die Defekterzeugung wird im Rahmen des "energy-spike"-Konzepts /77-79/ nicht mehr als Folge von Zweikörperstößen zwischen einem ruhenden und einem bewegten Teilchen angesehen, sondern als Ergebnis nach der energetischen Relaxation eines kollektiv angeregten Volumens hoher Energiedichte. Solche Volumina (spikes) können sich insbesondere bei der Implantation schwerer Ionen ausbilden, wenn es aufgrund der geringen mittleren freien Weglänge des Projektils zwischen zwei Stößen zu hohen Dichten bewegter Recoilatome kommt. Man erhält dann ein hochangeregtes Volumen mit einem quasi-flüssigen Kern. Mittlere Form und Größe des spike-Volumens sowie die darin verteilte Energie hängen von der Ion-Targetkombination ab.

Die energetische Relaxation von spikes läßt sich als Wärmediffusionsprozeß behandeln. Unter der Annahme einer radialsymmetrischen, gaußförmigen Energiedichteverteilung berechnet Hecking /73/ für die 2 MeV Si-Eigenimplantation den Radius der aufgeschmolzenen Zone als Funktion der Zeit, der Substrattemperatur, der Verteilungsbreite sowie der Kaskadenenergie. Er stellt fest, daß das Auseinanderlaufen der Energieverteilung in der ersten Phase nach der Erzeugung eines Spikes zu einer Vergrößerung des aufgeschmolzenen Volumens führen kann und erhält maximale Schmelzradien in der Größenordnung von wenigen nm.

Das spike-Volumen kann anschließend bei der Abkühlung von seiner Berandung aus epitaktisch kristallisieren. Wird die Kristallisationstemperatur

im Bereich des Kaskadenkerns unterschritten, bevor die Kristallisationsfront das spike-Zentrum erreicht, so bleibt ein amorpher Keim zurück. Seine Größe ist temperaturabhängig.

Eine (vollständige) Kristallisation von spikes kann unter den oben geschilderten Annahmen nur dann eintreten, wenn die vorliegenden Kristallisationsgeschwindigkeiten sehr hoch sind /73/. Mit zunehmenden Substrattemperaturen nimmt dann der kristallisierte Volumenanteil zu.

Da die epitaktische Kristallisation von der Berandung des aufgeschmolzenen Bereichs ausgeht, übt auch die dort vorliegende Schädigung einen Einfluß auf den Defektzustand des abgekühlten spike-Volumens aus. Insbesondere kann die epitaktische Kristallisation nicht von solchen Teilen der Kaskadenberandung ausgehen, wo bereits amorphe Bereiche vorliegen. Dies führt zu einem "stimulierten" Wachstum /64,72,73/ amorpher Volumina proportional zu den bereits vorliegenden amorphen Volumenanteilen.

2.3.3 Strahlenschädigung durch Siliziumeigenimplantation

Abb. 2.5 zeigt die Dosis- und Temperaturabhängigkeit des optisch (s. Kap. 4.1) in der Tiefe des Profilmaximums bestimmten Schädigungsgrades s für die 2 MeV Si-Eigenimplantation.

Vergleichbare Entwicklungen der Schädigung werden bei entsprechenden Targettemperaturen T_i auch für andere Primärenergien und Ionensorten beobachtet (1-20 MeV $^{28}\text{Si}^+ \rightarrow \text{Si}$, $T_i = 210$ K, /80/; 2 MeV $^{11}\text{B}^+ \rightarrow \text{Si}$, $T_i = 150$ K, /81/; 0.3 MeV $^{14}\text{N}^+ \rightarrow \text{Si}$, $T_i = 15-300$ K, /82/; 5 MeV $^{197}\text{Au}^{++} \rightarrow \text{Si}$, $T_i = 350-500$ K, /83,84/). Darüberhinaus liefern auch mit RBS/Channeling-Techniken durchgeführte Schädigungsuntersuchungen /85/ an 150 keV Si-Eigenimplantaten ähnliche Resultate.

Für die fünf in Abb. 2.5 markierten Bereiche läßt sich die Defektentwicklung getrennt diskutieren.

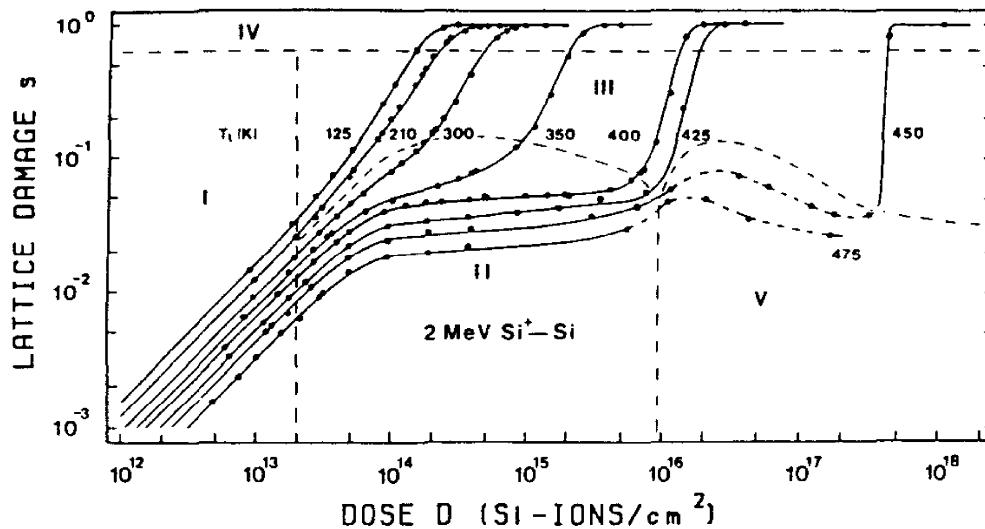


Abb. 2.5

Dosis- und Temperaturabhängigkeit des optisch bestimmten Schädigungsgrades im Bereich des Strahlenschädigungsmaximums für die 2 MeV Siliziumeigenimplantation. Die eingezeichneten Kurven wurden mit dem in Kap. 2.3.4 erläuterten Modell berechnet [72].

Bereich I

Bei hinreichend kleinen Dosen wächst die Schädigung proportional zur Dosis an, da sich jede Stoßkaskade noch in ungeschädigtem Gebiet ausbreiten kann und somit einen bestimmten Schädigungsbeitrag bewirkt. Die Abnahme der Defektausbeute ds/dD mit steigender Targettemperatur ist auf die zunehmende Ausheilung der innerhalb einzelner Kaskaden erzeugten Schäden zurückzuführen.

Bereich II

Oberhalb einer Dosis von etwa $2 \times 10^{13} \text{ Si/cm}^2$ werden die Kaskaden zunehmend in bereits geschädigtem Gebiet erzeugt, so daß nun die von verschiedenen Ionen verursachten Punktdefekte in den überlappenden Defektbereichen miteinander rekombinieren oder verclustern können. Bei höheren Temperaturen ist wegen der größeren Diffusionslängen die Rekombination begünstigt, wodurch sich ein schwächerer, plateauartiger Anstieg der Schädigung in Bereich II ergibt.

Bereich III

Stoßkaskaden bilden sich in zunehmend stärker geschädigten Targetbereichen aus. Die epitaktische Kristallisation eines spikes ist hier zunehmend eingeschränkt. Die Stabilisierung von Punktdefekten zu Clustern sowie das "stimulierte Wachstum" amorpher Volumina führen zu einem sich überproportional mit der Dosis entwickelnden Schädigungsgrad. Da die Wahrscheinlichkeit für die Bildung amorpher Bereiche mit zunehmender Targettemperatur sinkt, wird Bereich III im Falle höherer Temperaturen erst bei größeren Dosen durchlaufen.

Bereich IV

Bei allen Targettemperaturen bis zu 450 K erfolgt im Profilmaximum bei Dosen unterhalb $5 \times 10^{17} \text{ Si/cm}^2$ Schädigungssättigung durch Amorphisierung ($s = 1$). Eine weitere Steigerung der Dosis führt zu einer Verbreiterung der amorphen Schicht.

Bereich V

Der optisch bestimmte Schädigungsgrad durchläuft bei Implantationstemperaturen von 450 und 475 K im Dosisintervall zwischen 1×10^{16} und $2 \times 10^{17} \text{ Si/cm}^2$ ein breites Maximum. Dieses Verhalten des Schädigungsgrades ist korreliert /70,71/ mit der Umwandlung von Punktdefektclustern zu Stapelfehlern ($\emptyset \sim 100 - 150 \text{ Å}$), die z.B. für $T_i = 475 \text{ K}$ ab einer Dosis von $1 \times 10^{16} \text{ Si/cm}^2$ beobachtet werden. Die Stapelfehler liegen auf {113}-Ebenen. Sie wachsen mit zunehmender Dosis bis zu Durchmessern von etwa 350 - 400 Å und wandeln sich schließlich ($D \sim 2 \times 10^{16} \text{ Si/cm}^2$) in Versetzungsringe ($\emptyset \sim 300 \text{ Å}$) um, die bei weiterer Dosissteigerung bis etwa $3 \times 10^{17} \text{ Si/cm}^2$ zu einem dichten Versetzungsnetzwerk verknäulen. Die beobachtete Verringerung des optisch bestimmten Schädigungsgrades wird auf die mit dieser Defektumwandlung verbundene Relaxation gestörter Bindungen zurückgeführt. Die Defektumwandlungen können nach /70/ als thermisch aktivierte Prozesse erst dann mit größerer Wahrscheinlichkeit auftreten, wenn aufgrund höherer Targettemperaturen hinreichend lange Zeit für die Abkühlung des Kaskadenvolumens zur Verfügung steht.

2.3.4 Strahlenschädigungsmodell nach Hecking et al.

Die Entwicklung des Schädigungsgrades bei der 2 MeV Siliziumeigenimplantation kann in den oben beschriebenen Bereichen I-IV im Rahmen der Meßgenauigkeit exakt mit Hilfe des von Hecking et al. /72/ vorgeschlagenen Modells beschrieben werden. Auch zur Berechnung der Schädigung von Silizium durch Beschuß mit 300 keV N-Ionen bei tiefen Temperaturen (15-300 K) wurde dieses Modell erfolgreich angewandt /73/.

Der Schädigungsgrad s wird beschrieben als Summe der relativen Anteile der durch isolierte oder verclusterte Punktdefekte (s_p) bzw. durch Amorphisierung (s_a) geschädigten Bereiche:

$$s = s_p + s_a \quad . \quad (2.5)$$

Die Dosisabhängigkeit wird mit Hilfe zweier gekoppelter Differentialgleichungen behandelt:

$$\begin{aligned} \frac{ds_p}{dD} = & P_p [\exp (-R^2 D^2)] (1-s_a) + \\ & C s_p \left[1 - \frac{s_p}{s_p^* (1-s_a)} \right] - \frac{ds_a}{dD} \frac{s_p}{1-s_a} \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$\frac{ds_a}{dD} = (P_a + A_s s_a) (1-s_a) \quad . \quad (2.7)$$

Der erste Term von Gl. 2.6 beschreibt den Zuwachs des Schädigungsanteils s_p durch die primäre Produktion P_p von Punktdefekten in noch nicht amorphisierten Bereichen ($1-s_a$) unter Berücksichtigung der Rekombination R . Der zweite Ausdruck in Gl. 2.6 behandelt die Stabilisierung von Punktdefekten durch Clusterbildung, die zunächst proportional (Parameter C) zum bereits vorliegenden Punktdefektanteil s_p beginnt, und endet, wenn in den nicht amorphisierten Bereichen ein durch s_p^* beschriebener Sättigungswert vorliegt. Durch den Kopplungsterm in Gl. 2.6 wird der Abbau des Punktdefektanteils s_p zugunsten der Bildung amorpher Bereiche s_a erfaßt. Der Anstieg des amorphen Volumenanteils s_a mit zunehmender Dosis wird in Gl. 2.7 durch die Parameter P_a für die

primäre Produktion amorpher Bereiche und den Parameter A_s für deren "stimuliertes Wachstum" proportional zu den bereits vorliegenden amorphen Anteilen s_a beschrieben.

Die Modellparameter werden für jede Targettemperatur durch Anpassung berechneter Schädigungskurven an experimentelle Daten ermittelt (s. Abb. 2.5). Die damit festgelegte Temperaturabhängigkeit der Parameter spiegelt die sich mit der Targettemperatur ändernden Beiträge der verschiedenen Defekterzeugungs- und -wechselwirkungsmechanismen wider. Darüberhinaus läßt sich an Hand der Parameter der verschieden starke Einfluß der einzelnen Mechanismen bei der Schädigung durch Ionen unterschiedlicher Masse diskutieren (Kap. 6.2.4).

3. Metall-Silizium Verbindungen

Für das Verständnis der bei der Ionenstrahlsynthese einer Verbindung auftretenden Prozesse ist es hilfreich, wenn über das als Ion-Target Kombination gewählte Stoffsystem umfangreiche Untersuchungsergebnisse vorliegen. Gerade unter diesem Aspekt bieten sich einige Übergangsmetalle und darunter besonders Nickel für die Hochdosisimplantation in Silizium an. Im folgenden werden einige Eigenschaften von Übergangsmetallsiliziden (Kapitel 3.1) und dabei vor allem von Nickelsiliziden (Kapitel 3.2 und 3.3) dargestellt, die überwiegend aus Untersuchungen an Dünnsfilmsystemen bekannt sind.

3.1 Übergangsmetallsilizide

Die Bildung stabiler Metall-Silizium Verbindungen an Siliziumoberflächen wird insbesondere aus zwei Gründen seit gut zehn Jahren intensiv untersucht. Zum einen eignen sich, wie später noch näher erläutert wird, Metallsilizid/Silizium-Grenzflächen gut für das Studium von Schottky-Barrieren. Zum anderen können Übergangsmetallsilizide als Material für Leiterbahnen sowie ohmsche oder gleichrichtende Kontakte in hochintegrierten elektronischen Schaltkreisen verwendet werden (z.B. /86-89/).

Ein Vorteil gegenüber dem üblicherweise für Leiterbahnen und Kontaktierungen verwendeten Aluminium liegt in der höheren Temperaturstabilität von Siliziden an Grenzflächen mit Silizium, die mit zunehmender Hochintegration wegen der damit verbundenen kleineren Schichtdicken immer wichtiger wird /87/. Außerdem können Silizid-Schichten als Diffusionsbarriere gegen das Eindringen von Aluminium in Silizium verwendet werden /88/. Weiterhin ermöglichen die als Silizidkontakt hergestellten Schottky-Dioden kürzere Schaltzeiten als p-n Dioden /87/. Gegenüber dem häufig als Gate- oder Leiterbahnmaterial verwendeten polykristallinen Silizium /90,91/ und auch gegenüber hochdotierten Siliziumeinkristallen /92/ zeichnen sich Silizide durch ihre bessere Leitfähigkeit aus. Diese kann in einkristallinen Filmen /93/ sogar die des reinen metallischen Verbindungspartners erreichen.

Die konventionelle Herstellung von Silizidfilmen auf einem Silizium- oder SiO_2 -Substrat umfaßt in der Regel zwei Schritte. Der erste besteht im Aufbringen einer dünnen Metallschicht, einer Metall/Silizium-Mehrschichtstruktur oder einer Metall/Silizium-Mischschicht durch Aufdampfen oder Aufspütern auf eine gereinigte Oberfläche. Der zweite Schritt beinhaltet meist das Tempern in einem Ofen, mit Hilfe einer Halogenlampe oder eines Lasers, eine Elektronenbestrahlung oder das Ionenstrahlmischen bzw. eine Kombination solcher Behandlungen. Einen Überblick über die Bildungskinetik von Metallsiliziden durch Wärmebehandlung metallischer Dünnschichten auf Silizium geben d'Heurle und Gas /94/.

Die Siliziumverbindungen der Übergangsmetalle sind untergliedert in die sogenannten Halbedelmetallsilizide (near noble metal silicides) und die "hochschmelzenden" Silizide (refractory metal silicides). Zu der ersten Gruppe zählen die Siliziumverbindungen von Ni, Co, Pd und Pt, zur zweiten die von Ti, V, Cr, Y, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta und W. Beide Arten unterscheiden sich sowohl hinsichtlich ihrer Festkörpereigenschaften als auch in ihrem Wachstumsprozeß während konventioneller Herstellung. Der augenfälligste Unterschied in den Festkörpereigenschaften besteht im Schmelzpunkt, der bei den Siliziden der genannten Halbedelmetalle bei 835–1460 °C und für die "hochschmelzenden" Silizide der oben genannten Elemente bei etwa 1520–2200 °C /95/ liegt. Charakteristisch sind auch die geringeren Bildungstemperaturen der Halbedelmetallsilizide. Sie scheinen verknüpft zu sein mit grundlegenden Unterschieden im Wachstumsprozeß /96/. Während Silizide der ersten Gruppe dadurch wachsen, daß hauptsächlich die Metallatome durch die zwischen Metall und Silizium gebildete Silizidschicht in das Silizium eindiffundieren, sind es bei der zweiten Gruppe in erster Linie die Siliziumatome, die während des Wachstumsprozesses wandern. Wittmer und Tu /96/ korrelieren damit die Beobachtung, daß mit der Verlagerung der Silizid/Silizium-Grenzfläche beim Wachstum von Halbedelmetallsiliziden eine Umverteilung von Dotierstoffen im Silizium erfolgt, welche beim Wachstum von hochschmelzenden Siliziden nicht beobachtet wird.

Verschiedene Metallsilizide sind auf Grund ihrer Kristallstruktur in der Lage, epitaktisch auf Silizium aufzuwachsen. Systematische Untersuchungen /97/ der Fehlpassung zwischen (100)-, (110)- und (111)-Siliziumnetzebenen und den Netzebenen der Silizide aller Elemente der Reihen IIIB bis IB des Periodensystems (und die von LaSi_2) ergeben besonders gute epitaktische Verhältnisse zwischen Silizium und NiSi_2 (s. Kap. 3.3). Dies

Tab. 3.1

Die Phasen des Nickel-Silizium Systems. Die Daten der ersten vier Spalten stammen aus /98/, die Gitterkonstanten in der fünften Spalte aus /89/. (*) Die Gitterstruktur von Ni_5Si_2 wird in /98/ als trigonal angegeben, in neueren Arbeiten (z.B. /89,99/) als hexagonal. Die genaue Stöchiometrie ist dann $\text{Ni}_{31}\text{Si}_{12}$. Ferner wird in /99/ ein zweiter hexagonaler Polytyp von Ni_5Si_2 mit den in Klammern angegebenen Gitterkonstanten beschrieben. In verschiedenen Arbeiten wird hexagonales NiSi beobachtet mit den Gitterkonstanten $c=5.16 \text{ \AA}$ und $a=3.23 \text{ \AA}$ /100/, $a=3.28 \text{ \AA}$ /101/ bzw. $a=3.27 \text{ \AA}$ /102/.

Phase	Stöchiometrie	Symmetrie	Gittertyp	Gitterkonst. a, (b), (c) [Å]
β	$\beta_1 \text{Ni}_3\text{Si}$	ord fcc	Cu_3Au	3.504
γ	Ni_5Si_2	hexag.*	6.68 12.28 (6.68 18.42)
δ	$\delta \text{Ni}_2\text{Si}_{\text{LT}}$	orthor.	PbCl_2	3.72 4.99 7.03
ε	$\theta \text{Ni}_2\text{Si}_{\text{HT}}$	hexag.	
ζ	Ni_3Si_2	orthor.	12.229 10.80 6.924
η	ηNiSi	orthor.	MnP	5.18 3.34 5.62
θ	$\zeta' \text{NiSi}_2$	fcc (wie θ')	
θ'	ζNiSi_2	fcc	CaF_2	5.406

Alle sechs Verbindungen können als Dünnschicht durch Aufdampfen entsprechender Mengen an Silizium und Nickel auf eine nicht reaktive SiO_2 -Unterlage und anschließende Temperung des Ni/Si/SiO_2 -Schichtsystems erzeugt werden /103/. Bei etwa 250°C bildet sich zunächst eine Ni_2Si -Schicht zwischen der Nickel- und der Siliziumlage (Abb. 3.2). Die weitere Bildungssequenz der verschiedenen Phasen hängt wesentlich vom aufgetragenen Mengenverhältnis an Silizium und Nickel ab. Unter siliziumreichen Bedingungen setzt die Bildung von NiSi ein, sobald das

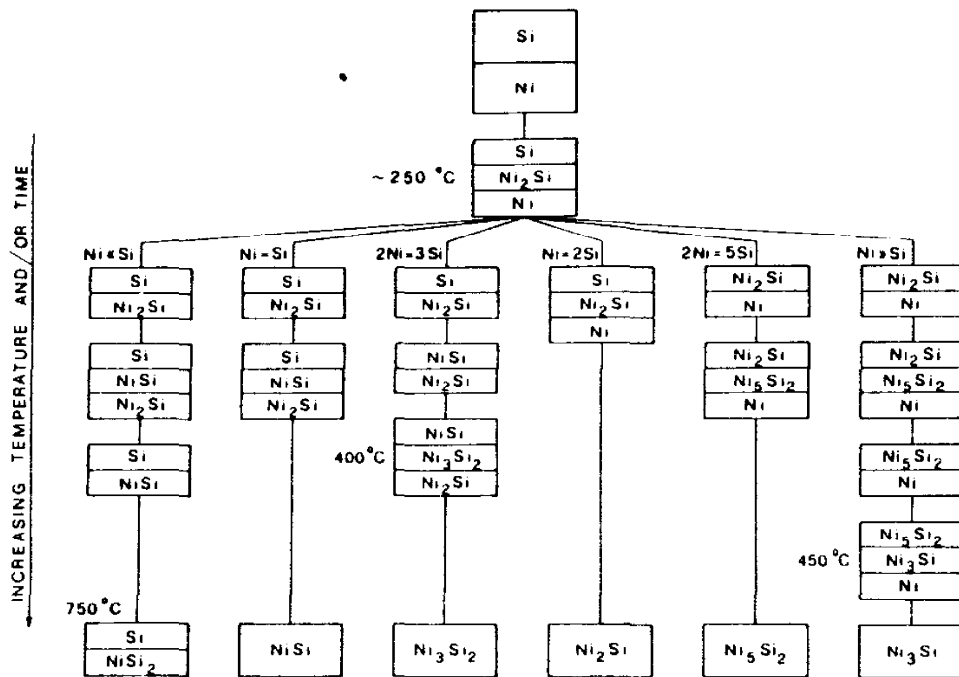


Abb. 3.2

Bildungssequenzen von Nickelsiliziden beim Tempern von Ni/Si-Schichtstrukturen auf SiO₂-Substraten für unterschiedliche Ni/Si-Schichtdickenverhältnisse im Temperaturbereich 200-750 °C /103/.

aufgebrachte Ni vollständig für die Bildung von Ni₂Si verbraucht ist. Die NiSi/Si-Schicht ist gegen weiteres Tempern bis zu einer Temperatur von ~ 750 °C stabil, bei der eine Umwandlung zu NiSi₂/Si erfolgt. Mindesttemperaturen werden auch für die Bildung anderer Nickelsilizide angegeben (Ni₃Si₂: 400 °C; Ni₃Si: 450 °C; /103/).

Die gleiche Bildungssequenz mit Ni₂Si als Vorläuferphase für NiSi, das wiederum als Vorläuferphase für NiSi₂ auftritt, und gleiche Bildungstemperaturen wie in dem oben geschilderten Experiment wurden häufig beim Tempern dünner Nickelfilme auf einem Siliziumsubstrat beobachtet /94/. Die selektive Bildung von Ni₂Si bzw. NiSi werden als diffusionskontrollierte Prozesse mit von der Substratorientierung abhängigen Anregungsenergien zwischen 1.3 und 1.6 eV /104/ bzw. 1.23 und 1.83 eV /105,106/ beschrieben. Die abrupt bei Temperaturen von meist 750-800 °C (s.u.) auftretende Umwandlung von NiSi in NiSi₂ wird dagegen als keimbildungskontrollierter Prozeß angesehen /94,107,108/.

gestützt auf die Beobachtung einzelner "NiSi₂-Säulen", die sich in der Anfangsphase der Reaktion senkrecht zur Oberfläche durch den gesamten Film ausbreiten.

Wegen des abrupten Verlaufs ist für die Bildung von NiSi₂ auf kristallinem Silizium bisher keine Anregungsenergie bekannt. Lediglich für die bereits bei etwa 80 °C (30 min) merkliche Rekristallisation einer Si-Ionenstrahlgeschädigten, "nahezu amorphen" NiSi₂-Schicht wird eine Aktivierungsenergie von 1.2 ± 0.2 eV bestimmt /109/. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, daß dieser Prozeß, anders als bei den oben beschriebenen Temperexperimenten an Ni/Si-Schichtsystemen, keine langreichweitige Diffusion erfordert, da bereits stöchiometrische Verhältnisse vorliegen. Die epitaktische Kristallisation der NiSi₂-Filme auf Siliziumsubstraten erfolgt schichtweise von ungeschädigten Tiefenzonen ausgehend.

Vergleichbare Anregungsenergien /110/ und Kristallisationstemperaturen /110-113/ wurden beim Tempern von amorphem oder "nahezu amorphem" NiSi₂ nach Xe- /110/ und Ar-Ionenbeschuß /111-113/ beobachtet. In einigen dieser Untersuchungen /110,112/ deutet sich ein kristallisationshemmender Einfluß der implantierten Fremdionen an.

Bereits bei der Herstellung von Metallsilizidschichten mit "konventionellen" Methoden (s. Kap. 3.1) stellen Verunreinigungen der Siliziumoberfläche sowie der Fremdatomgehalt der aufgedampften Metallschicht ein ernsthaftes Problem dar (z.B. /114-117/). Beispielsweise können Stickstoffverunreinigungen in einer aufgedampften Nickelschicht nicht nur zu verringerten Wachstumsraten und erhöhten Silizidbildungstemperaturen, sondern auch zu Änderungen in der Phasenbildungssequenz beim Tempern führen /116/.

Vor diesem Hintergrund ist es verständlich, daß sowohl die Frage der Phasenbildungssequenz /102,118/ als auch die der Bildungstemperaturen gegenwärtig noch Gegenstand kontroverser Diskussion sind.

Für die Bildung von NiSi₂ auf kristallinem oder polykristallinem Silizium durch Tempern von Nickelfilmen mit Dicken von mehr als etwa 100 Å werden Temperaturen zwischen 900 °C /119/ und 650 °C /92,120,121/ angegeben. Mäenpää et al. /110/ und Lien et al. /122/ finden, daß sich die Bildungstemperaturen von NiSi₂ auf kristallinem und amorphem Substrat erheblich unterscheiden (c-Si: 800 °C ; a-Si: 350-425 °C).

Lu et al. /118/ beobachten NiSi_2 -Bildung auf hoch B^+ - bzw. BF_2^+ -dotiertem kristallinem Silizium bereits bei Temperaturen von 250 - 280 °C. Die Reaktion erfolgt offenbar ohne vorherige Bildung von Ni_2Si oder NiSi als Vorläuferphasen und ohne vollständigen Verbrauch der aufgedampften Ni-Schicht.

Wesentlich geringere NiSi_2 -Bildungstemperaturen ($\sim 120 - 450$ °C) werden beobachtet, wenn wenige Monolagen an Nickel bei Raumtemperatur unter Ultrahochvakuumbedingungen (UHV) auf atomar reine Siliziumoberflächen aufgebracht und anschließend getempert werden /123-127/.

Es ist schon länger bekannt, daß unter UHV-Bedingungen bereits bei Raumtemperatur eine Durchmischung von Nickel und Silizium erfolgt /128-131/. Hinsichtlich der Zusammensetzung und Struktur der sich dabei bildenden Schicht wurden allerdings sehr widersprüchlich erscheinende Ergebnisse publiziert. Die mit einer Vielzahl an unterschiedlichen Methoden durchgeführten Untersuchungen ergeben Hinweise für das Vorliegen von Ni_2Si (z.B. /132-134/) oder NiSi (z.B. /125/) ebenso wie von NiSi_2 (z.B. /126,127,135-137/) bei Raumtemperatur. Darüberhinaus werden Diffusionsschichten (z.B. /129,131,137-138/) mit Ni-Atomen auf unterschiedlichen Si-Zwischengitterplätzen sowie Schichten mit abgestufter Zusammensetzung /128,129,139/ (Ni bis NiSi) diskutiert. Ein wichtiger Parameter für die Zusammensetzung der resultierenden Schicht ist, wie aus einigen /126,135,136,140/ Arbeiten hervorgeht, die genaue Menge des im Monolagenbereich deponierten Nickels.

Trotz der Unklarheit über die bei Raumtemperatur an der Oberfläche stattfindende Reaktion kann als sicher angesehen werden, daß Tempern bei 450 °C zur Bildung einkristalliner, epitaktischer NiSi_2 -Filme auf (100)-Si- und (111)-Si-Oberflächen führt, wenn zuvor wenige Monolagen an Nickel auf eine atomar reine Siliziumoberfläche aufgedampft werden (sog. "template"-Technik /123/, s. Kap. 3.3). Darüberhinaus zeigen neue Untersuchungen von Tung et al. /140/ zur NiSi_2 -Synthese durch Molekularstrahlepitaxie, daß sich epitaktische NiSi_2 -Filme (150 Å) sogar bei Raumtemperatur durch gleichzeitiges Aufdampfen von Ni und Si herstellen lassen, wenn zunächst etwa 2.5 Monolagen Nickel auf eine atomar reine Siliziumoberfläche bei Raumtemperatur aufgebracht werden.

Die atomare Struktur epitaktischer NiSi_2 -Schichten auf Silizium wird im folgenden näher erläutert.

3.3 Epitaxie von NiSi_2 auf Silizium

NiSi_2 wächst in kubischer CaF_2 -Struktur mit einer Gitterkonstanten von 5.406 \AA bei Raumtemperatur, die Elementarzelle enthält vier Nickel- und acht Siliziumatome (Abb. 3.3). Der NiSi_2 -Gitterparameter ist somit nur um etwa 0.4% kleiner als der des Si-Diamantgitters, dessen kubische Elementarzelle ebenfalls acht Siliziumatome umfaßt.

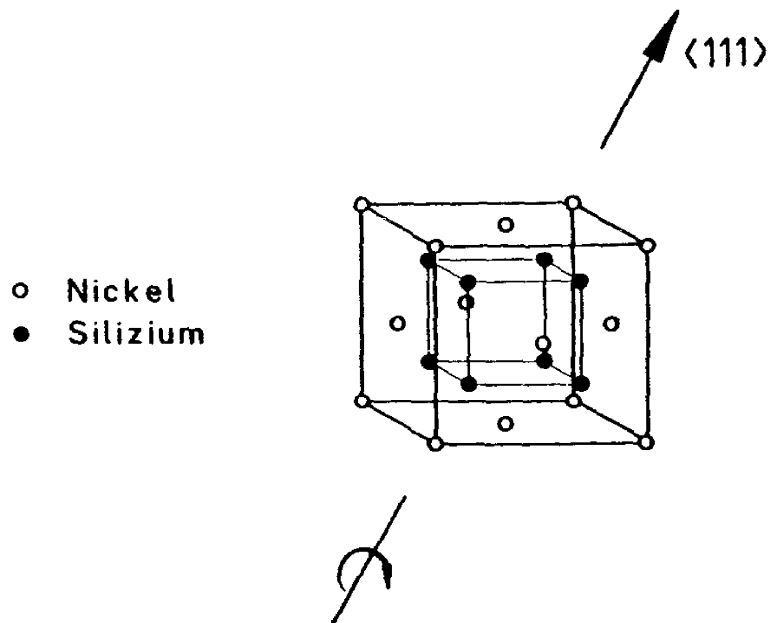


Abb. 3.3

Schematische Darstellung einer NiSi_2 -Elementarzelle. Der Pfeil gibt eine der vier möglichen Zwillingsachsen an.

Die Grenzflächen "konventionell" (Kap. 3.1) hergestellter, epitaktischer NiSi_2 -Filme auf Silizium sind auf atomarer Skala glatt, aber makroskopisch facettiert, wobei $\{111\}$ -Grenzflächen gegenüber $\{100\}$ -Facetten bevorzugt auftreten /141-146/. Dies beruht möglicherweise auf der geringeren Dichte an gestörten Bindungen in $\{111\}$ -Grenzflächen /146/.

Auf $\{111\}$ -Siliziumoberflächen kann NiSi_2 unter zwei verschiedenen Orientierungen epitaktisch wachsen. In Typ-A orientiertem NiSi_2 verlaufen alle Kristallrichtungen wie im Silizium. Bei der Typ-B Orientierung haben NiSi_2 und Silizium eine gemeinsame $\langle 111 \rangle$ -Richtung, alle übrigen Kristallrichtungen sind bezüglich der gemeinsamen $\langle 111 \rangle$ -Achse um 180°

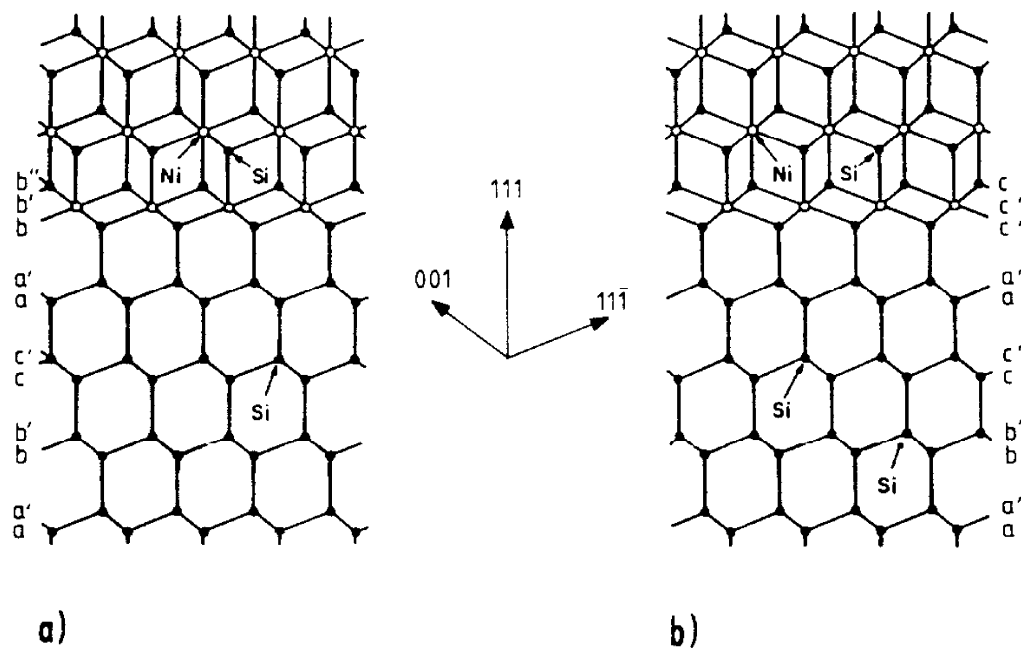


Abb. 3.4

$[1\bar{1}0]$ - Projektionen der atomaren Struktur von Typ-A (a) bzw. Typ-B (b) $\text{NiSi}_2/\text{Si}(111)$ - Grenzflächen entsprechend dem Modell 7-facher Ni-Koordination (nach /148/).

gedreht (Abb. 3.3). Die Typ-B Orientierung wird daher auch als Zwillingsorientierung bezeichnet, denn mit der 180° -Drehung ist eine Spiegelung in der Stapelfolge der (111)-Ebenen verbunden (Abb. 3.4).

Untersuchungen der atomaren Grenzflächenstruktur von NiSi_2 -Filmen mit Hilfe der Hochauflösungselektronenmikroskopie (HRTEM) /145,146/, Ionenchanneling /147/ und anderer Methoden /148/ zeigen, daß sowohl Typ-A als auch Typ-B $\text{NiSi}_2/\text{Si}(111)$ -Grenzflächen aus Si-Si Bindungen gebildet werden. Dies bedeutet, daß die Nickelatome der Grenzfläche 7-fach koordiniert sind, während jedes Ni-Atom innerhalb eines NiSi_2 -Kristalls acht nächste (Si-) Nachbarn hat. Die Si-Si Bindungen der Grenzfläche sind um wenige Prozent kontrahiert /147/. Typ-A und Typ-B $\text{NiSi}_2/\text{Si}(111)$ -Grenzflächen sind in Abb. 3.4 schematisch dargestellt.

Konventionell unter Nicht-UHV-Bedingungen hergestellte, epitaktische NiSi_2 -Filme auf (111)-orientierten Siliziumsubstraten bestehen gewöhnlich zu etwa gleichen Anteilen aus Typ-A und Typ-B NiSi_2 -Bereichen (Doppelpositionierung).

Tung et al. /123/ gelingt es, unter UHV-Bedingungen die Kristallorientierung zu kontrollieren und einkristalline epitaktische NiSi_2 -Filme auf (111)-Silizium zu erzeugen. Dabei wird die Beobachtung /123/ ausgenutzt, daß sich dünne einkristalline Filme mit Typ-B Orientierung nach kurzem Tempern (450-550 °C, 3-5 min.) gerade dann bilden, wenn bei Raumtemperatur aufgedampfte Nickelfilme von 1 - 7 Å Dicke verwendet werden, während man bei Schichtdicken von 16 - 20 Å reine Typ-A NiSi_2 -Dünnsfilme erhält. Bei Ni-Schichtdicken zwischen 7 und 16 Å sowie oberhalb von 20 Å bilden sich doppeltpositionierte NiSi_2 -Schichten. Die versetzungsfreien, ultradünnen NiSi_2 -Filme (Typ-A oder B) lassen sich als Vorlage ("template") verwenden, um anschließend durch abwechselndes Aufdampfen von Nickel und anschließendes Tempern einen dicken (~1000 Å) NiSi_2 -Film unter Beibehaltung der Kristallorientierung des templates zu erzeugen.

Die Ursache für die Abhängigkeit der Kristallorientierung solcher NiSi_2 -Dünnsfilme von der Dicke der verwendeten Ni-Schicht konnte bis heute nicht geklärt werden /148/, da die Untersuchungen zur Raumtemperaturreaktion von Nickelfilmen auf Silizium kein schlüssiges Bild hinsichtlich der Bildung von Vorläuferphasen ergeben.

Eine mögliche Erklärung /123,148/ für das "A-B-Rätsel" /136/ beruht auf der Feststellung /149/, daß die freie Energie einer Typ-B NiSi_2 /(111)Si Grenzfläche geringer ist als die des Typ-A Pendants. Die Bildung von Typ-B NiSi_2 aus einer bei geringen Nickelmengen möglicherweise vorhandenen Vorläuferphase ist demnach begünstigt. Bei größeren Nickelmengen könnte eine solche Vorläuferphase durch das eindiffundierende Nickel verändert werden und die Bildung von Typ-A NiSi_2 -Keimen ermöglichen. Das Wachstum von Typ-A NiSi_2 scheint gegenüber dem des Zwillingstyps begünstigt zu sein, da die Verschiebung der Typ-A NiSi_2 -Grenzschicht um einen {111}-Gitterabstand lediglich die Umordnung *einer* Lage von Si-Atomen bei gleichzeitiger Diffusion einer Atomlage von Nickel erfordert. Dagegen ist für das Wachstum von Typ-B NiSi_2 um einen {111}-Netzebenenabstand die Verlagerung einer größeren Anzahl von Si-Atomen erforderlich /123/ (s. Diskussion in Kap. 6.2.9).

Einkristalline Metallfilme auf Silizium mit atomar scharfen Grenzflächen bekannter Struktur bieten ideale Voraussetzungen zur theoretischen und experimentellen Untersuchung von Metall-Halbleiterkontakten. Dabei stand bisher die Frage im Vordergrund, ob Typ-A und Typ-B Grenzflächen mit unterschiedlichen Schottky-Potentialen verknüpft sind /138,150-154/.

Mittlerweile zeichnet sich ab, daß — in qualitativem Einklang mit theoretischen Vorhersagen — die unterschiedliche Bindungsstruktur von Typ-A und Typ-B NiSi_2 -Grenzflächen zu unterschiedlichen Schottky-Barrierenhöhen führt (z.B. /153/, Übersicht in /148/).

Die Vorzüge epitaktischer Metallsilizid-Silizium Grenzflächen für das Studium von Schottky-Kontakten sind, wie eingangs erwähnt, *eine* Ursache für das hohe Interesse an Metallsilizidfilmen. Ein weiterer Grund resultiert daraus, daß es durch die Kontrolle der Kristallorientierung des Silizidfilms möglich geworden ist, mit UHV-Methoden heteroepitaktische $\text{Si}/\text{NiSi}_2/\text{Si}$ - bzw. $\text{CaF}_2/\text{NiSi}_2/\text{Si}$ -Schichtstrukturen zu erzeugen, die sich zur Herstellung neuartiger Halbleiterbauelemente eignen. Die Bildung und die Anwendungsmöglichkeiten solcher Schichtstrukturen werden in verschiedenen Arbeiten erläutert /152,155-158/.

4. Untersuchungsmethoden

4.1 Messung der optischen Reflektivitätsänderung

Die durch die Ionenimplantation hervorgerufenen Bindungsstörungen des Siliziumgitters sowie die erzeugten Fremdatombindungen führen zu Änderungen der optischen Konstanten n und k und somit zur Änderung der optischen Reflektivität R . Messungen der optischen Reflektivitätsänderung können somit sowohl zur Bestimmung von Strahlenschädigungsprofilen als auch für Untersuchungen der Fremdatomverteilung eingesetzt werden.

4.1.1 Meßprinzip

Zur Messung von Tiefenprofilen der optischen Reflektivitätsänderung an schräggeschliffenen Proben (s. Kapitel 5.3) wurde die in Abb. 4.1 skizzierte Apparatur eingesetzt. Die Schliefffläche wird mit monochromatischem Licht bei Wellenlängen λ zwischen 405 nm und 950 nm in senkrechter Inzidenz beleuchtet und mit Hilfe eines Mikroskops vergrößert

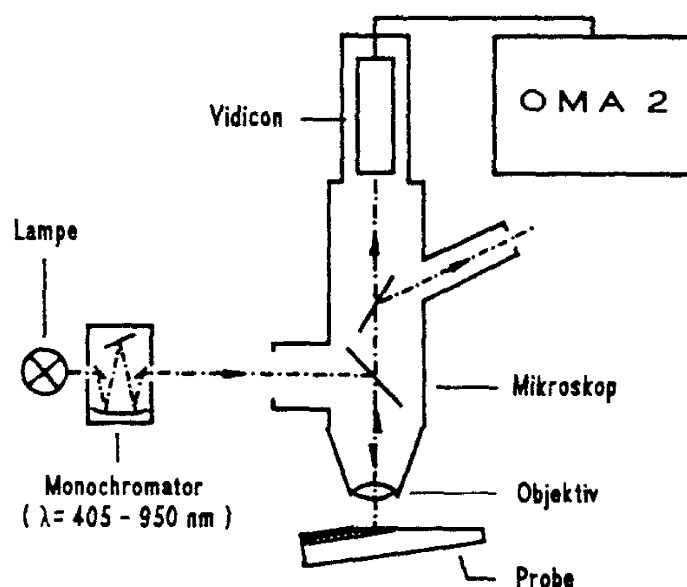


Abb 4.1

Schematische Darstellung der verwendeten Apparatur zur Messung von Tiefenprofilen der optischen Reflektivitätsänderung.

auf das Photodiodenarray eines Vidicondetektors abgebildet. Die von jeder Zeile des Diodenarrays registrierten Intensitäten werden mit Hilfe eines Vielkanalanalysators (OMA 2, PAR) gemittelt, so daß man eine eindimensionale Intensitätsverteilung erhält. Durch Vergleich mit einer im nicht strahlengeschädigten Bereich der Schliifffläche gewonnenen Intensitätsverteilung erhält man daraus das Tiefenprofil der optischen Reflektivitätsänderung, bezogen auf die Reflektivität ungestört kristallinen Siliziums R_c :

$$\frac{\Delta R}{R_c}(z) = \frac{R(z) - R_c}{R_c} \quad (4.1)$$

Eine detaillierte Beschreibung des Meßprinzips und der verwendeten Meßapparatur wird von Heidemann /159,160/ gegeben.

Der Einfluß der Zählstatistik des Vidicondetektorsystems läßt sich so klein halten, daß die Fluktuation der Reflektivitätsänderung lediglich durch die Rauigkeit der Schliifffläche bestimmt wird. Die erzielbare Güte der Schliifffläche ist materialabhängig. Für kristallines Silizium lassen sich typische Standardabweichungen der Reflektivitätsänderung von etwa 3×10^{-4} , für amorphes Silizium von 1×10^{-3} bei einer Wellenlänge von 650 nm erreichen.

Die Tiefenauflösung beträgt bei der verwendeten Mikroskopvergrößerung und Schliiffwinkeln von 1.3° etwa $0.03 \mu\text{m}$ pro Meßkanal. Durch die Unsicherheit in der Zuordnung eines Kanals zur Schliiffkante und durch den Schliiffwinkelfehler (s. Kapitel 5.3) resultiert daraus ein Fehler in der Bestimmung der absoluten Tiefe von $\pm 0.1 \mu\text{m}$ für eine Tiefe von $z = 3 \mu\text{m}$.

4.1.2 Interpretation von Tiefenprofilen der optischen Reflektivitätsänderung

Untersuchungen der Strahlenschädigung von Silizium nach Niederdosis-Germaniumimplantation bei tiefen Temperaturen zeigen, daß Gitterschäden zur Erhöhung der Reflektivität im Spektralbereich von etwa 420-1000 nm führen /159/. Die Reflektivität steigt mit zunehmender Schädigung, bis ein Sättigungswert erreicht wird, der vollständig amorphisierte Siliziumschichten charakterisiert. Die auf die Reflektivitätsänderung $\Delta R_{ia}/R_c$ von

ionenstrahlamorphisiertem Silizium normierte Reflektivitätsänderung $\Delta R/R_c$ kann daher als Maß für den optisch bestimmten Schädigungsgrad s verwendet werden (z.B. /65,71-73,80,84/):

$$s = \frac{\Delta R/R_c}{\Delta R_{ia}/R_c} = \frac{\Delta R}{\Delta R_{ia}} = \frac{R - R_c}{R_{ia} - R_c} \quad (4.2)$$

Diese Definition legt den Schädigungsgrad auf Werte zwischen 0 für kristallines Silizium (c-Si) und 1 für ionenstrahlamorphisiertes Silizium (ia-Si) fest. Sie läßt sich mit Hilfe der von Aspnes et al. /161/ diskutierten "effective medium approximation", eines Modells zur Berechnung der optischen Konstanten eines homogenen, mehrkomponentigen Stoffgemisches, motivieren /64/.

In diesem Modell werden die komplexen Permittivitäten $\tilde{\epsilon}_i$ unterschiedlicher Materialien entsprechend ihrer relativen Volumenanteile V_i gemischt:

$$\sum_i V_i \frac{\tilde{\epsilon}_i - \tilde{\epsilon}}{\tilde{\epsilon}_i + 2\tilde{\epsilon}} = 0 \quad , \quad \sum_i V_i = 1 \quad (4.3)$$

$\tilde{\epsilon}$: Permittivität der Mischung

Der Zusammenhang zwischen der komplexen Permittivität $\tilde{\epsilon}_i$ und den optischen Konstanten n_i und k_i einer Komponente ist gegeben durch:

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_i &= \epsilon_{1i} + i \cdot \epsilon_{2i} \\ \epsilon_{1i} &= n_i^2 - k_i^2 \\ \epsilon_{2i} &= 2 n_i k_i \end{aligned} \quad (4.4)$$

Der Realteil ϵ_{1i} beschreibt die Polarisation der Komponente i , der Imaginärteil ϵ_{2i} gibt deren Absorption an.

Aus dem Brechungsindex n und dem Absorptionsindex k ergibt sich die Reflektivität R für den vorliegenden Fall senkrechter Inzidenz und unter Vernachlässigung /159/ von Interferenzeffekten (vgl. Abb. 4.4):

$$R = \left| \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (4.5)$$

$$\tilde{n} = n + ik$$

\tilde{n} : komplexer Brechungsindex

Mischt man die optischen Konstanten für die beiden Extremalzustände c-Si und ia-Si, so erhält man gemäß Gl. 4.2 - 4.5 für Wellenlängen zwischen 550 nm und 950 nm einen nahezu linearen Zusammenhang (Abb. 4.2) zwischen dem amorphen Volumenanteil und der normierten Reflektivitätsänderung $(\Delta R/R_c) / (\Delta R_{ia}/R_c)$, was die Interpretation dieser Größe als Schädigungsgrad (Gl. 4.2) rechtfertigt.

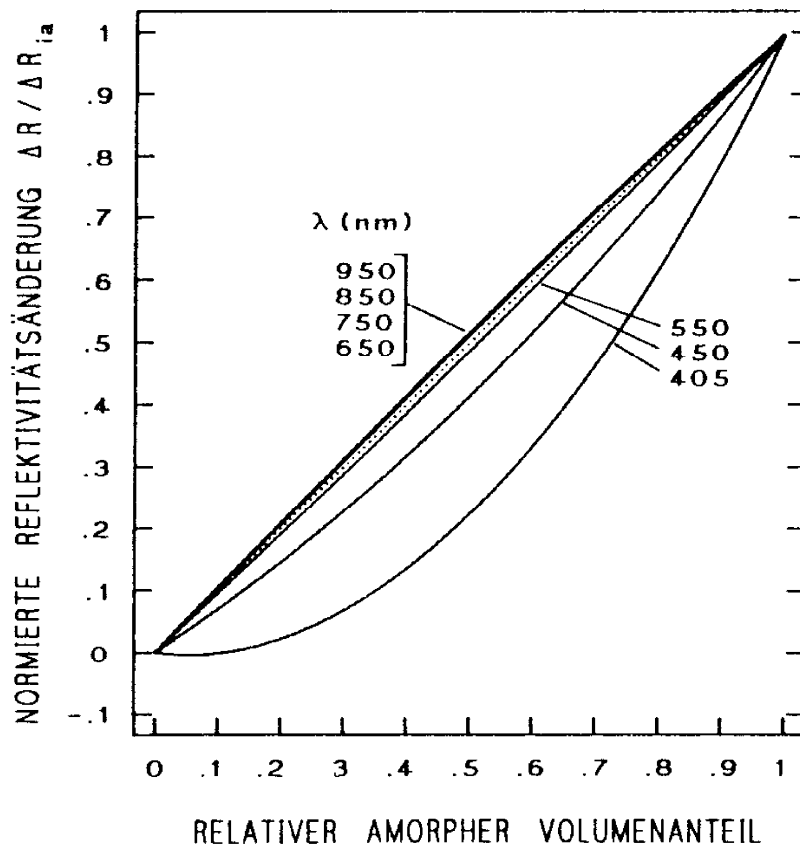


Abb. 4.2

Funktionaler Zusammenhang zwischen der normierten Reflektivitätsänderung $\Delta R/\Delta R_{ia}$ einer Mischung aus amorphem und kristallinem Silizium und dem Volumenanteil an amorphem Silizium für verschiedene Wellenlängen, berechnet mit Hilfe des EMA-Modells und optischen Konstanten aus [54].

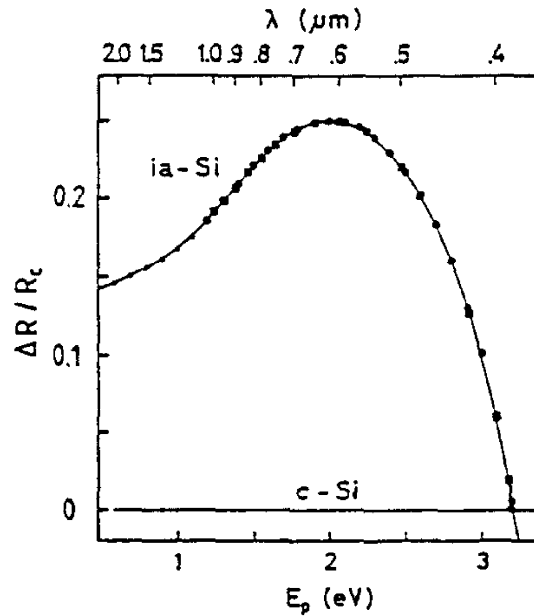


Abb. 4.3

Spektraler Verlauf der optischen Reflektivitätsänderung $\Delta R/R_c$ von amorphem (ia-Si) und kristallinem (c-Si) Silizium /54/.

Da die Reflektivitätsänderung von ionenstrahlamorphisiertem Silizium $\Delta R_{ia}/R_c$ bei einer Wellenlänge von etwa 650 nm maximal ist (Abb. 4.3), eignet sich diese Wellenlänge besonders zur Untersuchung der Strahlenschädigung und wird daher in den nachfolgend beschriebenen Schädigungsanalysen – falls nicht anders vermerkt – verwendet. Diese Wellenlänge wurde auch bei einem großen Teil /64,70-73,80,82-84/ der bisher durchgeführten optischen Schädigungsuntersuchungen benutzt, wodurch ein einfacher Vergleich mit bereits vorliegenden Ergebnissen ermöglicht wird.

Untersuchungen /73/ an Siliziumeigenimplantaten ($T_i = 210$ K, $D = 1 - 5 \times 10^{14}$ Si/cm²) mit Wellenlängen zwischen 450 und 950 nm zeigen, daß der gemäß Gl. 4.2 bestimmte Schädigungsgrad im Bereich von 600-950 nm nahezu wellenlängenunabhängig ist, solange die bei 650 nm gemessene Schädigung etwa den Wert 0.1 übersteigt. Bei geringerer Schädigung ($0.01 < s_{650 \text{ nm}} < 0.05$) führt die Verwendung größerer (750 nm) bzw. kleinerer (550 nm) Wellenlängen systematisch zu größeren bzw. kleineren Schädigungsgraden, die Abweichungen $\Delta s/s$ betragen bis zu 25%.

Neben der Strahlenschädigung können auch abgelagerte Fremdionen die Reflektivität beeinflussen. Dies läßt sich zur Bestimmung der Lage des Ionenprofilmaximums ausnutzen /54,160,41,83,42,84/, falls der schädigungsbedingte Beitrag zur Reflektivitätsänderung bekannt ist. Diese Bedingung ist beispielsweise für den Tiefenbereich amorpher Schichten erfüllt.

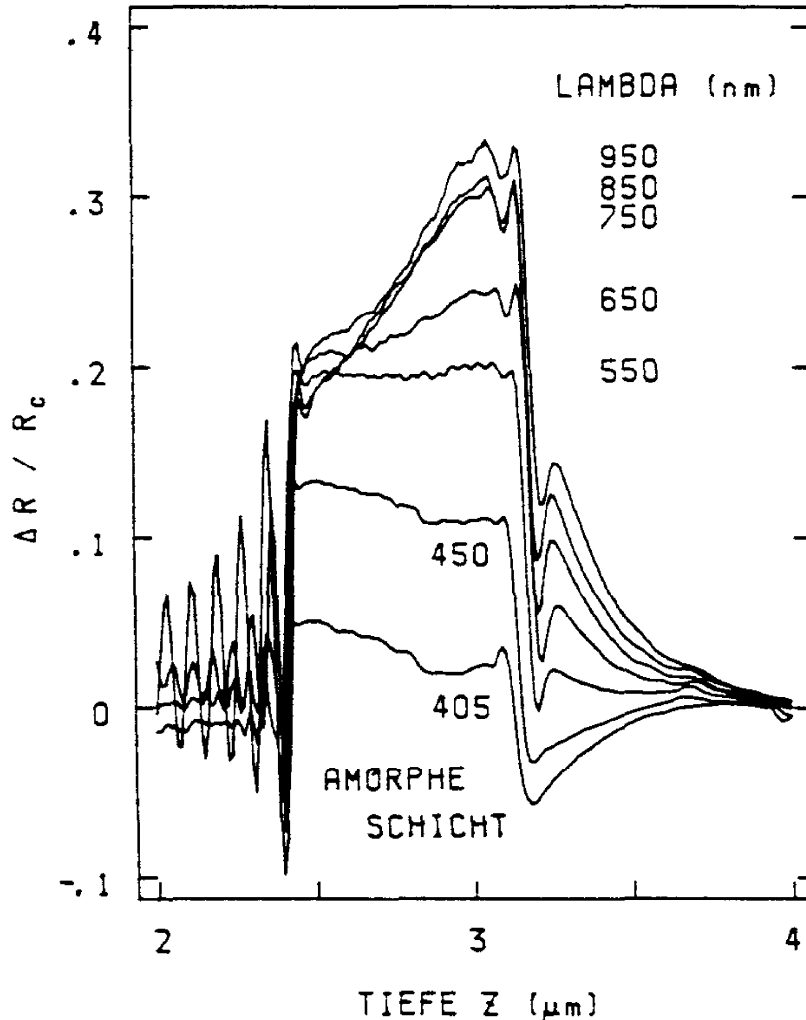


Abb. 4.4

Spektralserie der relativen Reflektivitätsänderung $\Delta R/R_c$ von Silizium nach 6 MeV $^{48}\text{Ti}^{3+}$ -Implantation ($T_i = 450 \text{ K}$, $D = 5 \times 10^{17} \text{ Ti/cm}^2$) im Tiefenbereich von 2 bis 4 μm . Zwischen 2.4 und 3.2 μm Tiefe liegt eine amorphe Schicht vor, bei 3.0 μm befindet sich das Maximum des Ti-Konzentrationsprofils. Die starke Änderung des Brechungsindex an der vorderen kristallin/amorphen Grenzschicht führt zu einer bei hohen Wellenlängen schwach gedämpften rücklaufenden Welle und wegen der Interferenz mit der an der Probenoberfläche reflektierten Welle zu den Oszillationen (Keilinterferenzen) im vorderen Profilbereich ($z < 2.4 \mu\text{m}$).

Abb. 4.4 zeigt beispielhaft Tiefenprofile der Reflektivitätsänderung von Silizium bei unterschiedlichen Wellenlängen nach der Bestrahlung mit 6 MeV $^{48}\text{Ti}^{3+}$ - Ionen für eine Dosis von $5 \times 10^{17} \text{ Ti/cm}^2$. Die Implantation bei 450 K führt im Tiefenintervall zwischen 2.4 und 3.2 μm zur Ausbildung einer amorphen Schicht, die bei einer Wellenlänge von 550 nm durch eine nahezu konstante Reflektivitätserhöhung gekennzeichnet ist. Die abgelagerten Titanionen (Konzentrationsmaximum bei $z = 3.0 \mu\text{m}$) bewirken bei Wellenlängen oberhalb 550 nm eine zusätzliche Reflektivitätserhöhung, bei Wellenlängen unterhalb 550 nm eine Reflektivitätsverringern unter den Plateauwert reiner amorpher Siliziumschichten.

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird gezeigt werden, daß die unterschiedliche Wellenlängenabhängigkeit der Beiträge der Strahlenschäden und der deponierten Fremdatome zum optischen Signal ausgenutzt werden kann, um den Einfluß der Fremdatome von dem der Strahlenschäden in Tiefenprofilen der Reflektivitätsänderung zu unterscheiden.

4.2 Messung des Ausbreitungswiderstandes

Um die hergestellten Implantate nicht allein hinsichtlich ihrer strukturellen, sondern auch bezüglich ihrer elektrischen Eigenschaften charakterisieren zu können, wurde eine rechnergesteuerte Apparatur /162,163/ zur Messung von Tiefenprofilen des Ausbreitungswiderstandes $R_s(z)$ /164/ am Schrägschliff entwickelt.

Der Ausbreitungswiderstand R_s (spreading resistance, constriction resistance) ist definiert als der Quotient aus Spannungsabfall und Stromstärke, der sich bei Stromfluß durch einen *kleinen* Metallkontakt in ein Material mit dem spezifischen Widerstand ρ ergibt. Er resultiert aus der räumlichen Einschnürung des elektrischen Stromes im Bereich hoher elektrischer Feldstärke nahe der Kontaktstelle.

Für einen homogenen Kontakt zwischen einer ideal leitenden Substanz und einem halbumendlich ausgedehnten, homogenen Material der Leitfähigkeit $\sigma = \rho^{-1}$ erhält man unter der Annahme einer ebenen, kreisförmigen

Kontaktfläche (Abb. 4.5) mit dem Radius a und unter Vernachlässigung von Schottky-Widerständen /165/:

$$R_s = \frac{\rho}{4a} \quad (4.6)$$

Der Ausbreitungswiderstand verhält sich somit unter diesen stark vereinfachenden Voraussetzungen proportional zum spezifischen Widerstand ρ und umgekehrt proportional zum Kontaktradius a . Der Faktor $1/4$ ergibt sich aus der vorliegenden Geometrie der Kontaktfläche.

Da der größte Teil des Potentialabfalls in der direkten Umgebung des Kontaktes auftritt (Abb. 4.5), wird der Ausbreitungswiderstand außer von der Kontaktgröße und -form hauptsächlich von der Leitfähigkeit am Meßort bestimmt. Messungen des Ausbreitungswiderstandes liefern somit ein relatives Maß für die lokale Leitfähigkeit, das Meßvolumen umfaßt in etwa eine Halbkugel mit dem Radius $2-3a$. In der daraus für kleine Spitzen resultierenden hohen räumlichen Auflösung liegt der wesentliche Vorteil gegenüber anderen Verfahren /166/ zur Charakterisierung elektrischer Eigenschaften, wie z. B. der "van der Pauw-" /167/ oder "Vier-Spitzen-Methode" /168/.

Da Gl. 4.6 insbesondere für Druckkontakte auf Halbleiteroberflächen eine zu starke Vereinfachung darstellt und die Kontaktgeometrie sowie der Kontaktradius in der Regel nicht hinreichend genau ermittelt werden

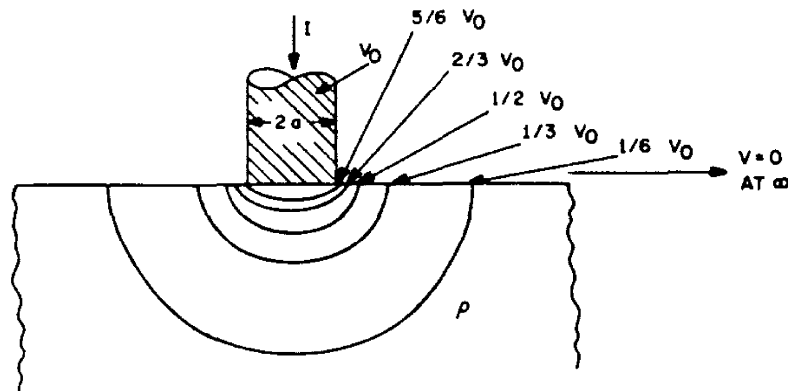


Abb. 4.5

Potentialverlauf an einem ebenen, kreisförmigen Kontakt auf einem halbbunendlich ausgedehnten Material mit homogenem spezifischen Widerstand. Bereits im Abstand $4a$ vom Kontaktmittelpunkt ist das Potential auf weniger als $1/6$ abgesunken /165/.

können, sind umfangreiche Messungen des Ausbreitungswiderstandes an Kalibrierproben bekannter Leitfähigkeit notwendig, um aus gemessenen R_s -Werten spezifische Widerstände ρ exakt zu bestimmen /164/.

Ferner muß bei Proben endlicher Ausdehnung oder inhomogener Leitfähigkeit, wie z.B. bei Schichtstrukturen, der Einfluß der Leitfähigkeitsänderung auf den Potentialverlauf innerhalb des Meßvolumens bei der Berechnung von ρ aus R_s berücksichtigt werden. Die meisten Verfahren zur Berechnung entsprechender Korrekturfaktoren $CF(z)$ für Tiefenprofile des Ausbreitungswiderstandes $R_s(z)$ beruhen auf dem Vielschicht-Potentialverteilungsansatz nach Schuhmann und Gardner /169/ oder der "local-slope"-Interpolation nach Dickey und Ehrstein /170/ und erfordern erheblichen numerischen Aufwand.

Aus diesem Grunde wird die spreading resistance-Messung am Schrägschliff häufig /166,171/ und auch in der vorliegenden Arbeit lediglich als vergleichende Methode zur Beurteilung implantations- oder temperungsbedingter Änderungen des Leitfähigkeitsprofils verwendet. Der spezifische Widerstand kann allerdings aus dem Ausbreitungswiderstand abgeschätzt werden.

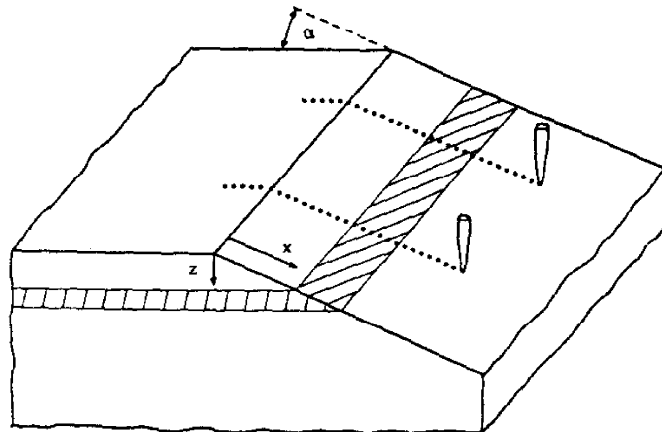


Abb. 4.6

Geometrische Verhältnisse bei der Zwei-Spitzen-Messung von Tiefenprofilen des Ausbreitungswiderstandes am Schrägschliff /162/.

Die Aufnahme eines Ausbreitungswiderstandsprofils erfolgt durch sukzessives Abtasten einer schräggeschliffenen Probe mit zwei Meßspitzen, die jeweils an gleichweit von der Schliffkante entfernten Stellen abgesenkt werden (Abb. 4.6). Die Meßsonden bestehen aus Wolframcarbid und haben Spitzenradien von etwa $1\ \mu\text{m}$.

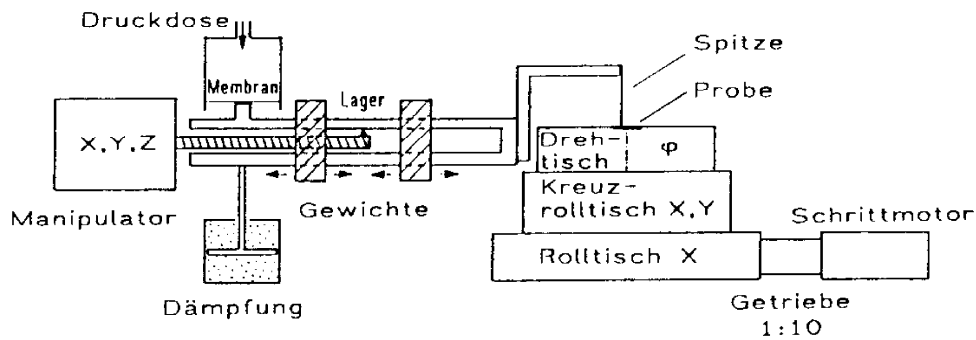


Abb. 4.7

Schematisches Schnittbild der Absenkmechanik einer Meßspitze sowie des Aufbaus zur Probenjustierung und -translation (nach /162/).

Jede Meßspitze ist an einem ausbalancierbaren, schwingungsgedämpften Hebelarm angebracht, der mittels einer pneumatisch angetriebenen Membran angehoben und abgesenkt werden kann (Abb. 4.7). Die Hebelarme werden von separaten Präzisionslagern getragen, die zur Justierung der Meßspitzen in drei Dimensionen an Mikropositionierern befestigt sind. Dieser Aufbau erlaubt ein unabhängiges, langsames und senkrechtes Aufsetzen der Sonden bei Auflagekräften bis herab zu 1 mN.

Die Probe ist elektrisch isoliert auf einer Anordnung von Positioniertischen befestigt und kann mittels eines untersetzten Schrittmotors um Strecken von minimal 0.2 μm verschoben werden. Als Abstand zwischen zwei Meßpositionen auf der Schlifffläche wird typischerweise ein Wert von etwa 2.5 μm eingestellt, was bei einem Schliffwinkel von 1.3° einem Tiefenintervall von 57 nm entspricht.

Die Widerstandsbestimmung im Bereich $10^0 - 4 \times 10^8 \Omega$ erfolgt durch Messung der Spannung, die bei Einstellen eines Konstantstromes zwischen den Meßspitzen abfällt. Der Strom wird im Intervall von $5 \times 10^{-9} - 1 \times 10^{-4} \text{ A}$ so gewählt, daß sich ein Spannungsabfall von einigen mV ergibt und die Messung möglichst ($R_s \ll 2 \times 10^7 \Omega$) im linearen Bereich der Strom-Spannungskennlinie des Metall-Halbleiter-Kontakts erfolgt /162/.

Das verwendete Digitalvoltmeter (Keithley Modell 195A) sowie die Konstantstromquelle (Keithley Modell 224) werden von einem Kleinrechner (Commodore CBM-3032) gesteuert und ausgelesen. Dieser Rechner kontrolliert auch die Schrittmotorsteuerung und sorgt für das pneumatische Anheben und Absenken der Meßspitzen.

4.3 Auger-Elektronenspektroskopie

Zur Bestimmung der Tiefenverteilung implantierter Ni-Atome eignet sich die Auger-Elektronenspektroskopie (AES) /172,173/.

In Abb. 4.8 ist zur Erläuterung des Auger-Überganges das Termschema des Silizium-Festkörpers dargestellt. Ionisiert man ein inneres Energieniveau beispielsweise durch Bestrahlung mit Elektronen hinreichender Energie (hier 3 keV), so kann das angeregte System durch Übergang eines Elektrons aus einem höheren Niveau in die entstandene Lücke in einen energetisch günstigeren Zustand zurückkehren. Dieser Übergang kann strahlungslos erfolgen, wenn die dabei frei werdende Energie an ein anderes Elektron des Atoms übertragen wird. Bei hinreichend großem Energieübertrag verläßt dieses sogenannte Auger-Elektron das Atom mit einer elementspezifischen kinetischen Energie, typischerweise zwischen 10 und 2500 eV. Der Übergang wird entsprechend der in der Röntgen-Physik üblichen Nomenklatur nach den daran beteiligten Niveaus benannt.

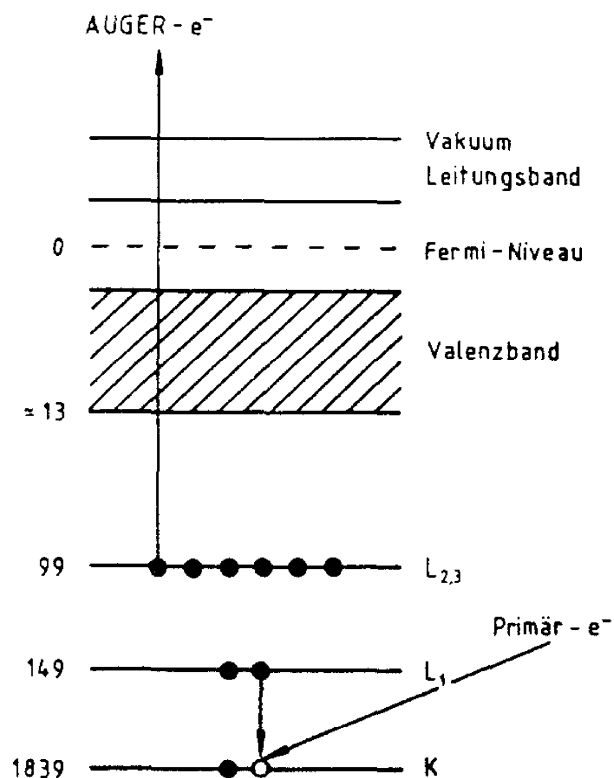


Abb. 4.8

Schematische Darstellung des Si-KL₁L_{2,3}-Überganges am Termschema eines Silizium-Festkörperatoms. Links sind die Ionisationsenergien in eV angegeben (nach /174/).

Hier handelt es sich um einen Si-KL₁L_{2,3}-Übergang. Bei Beteiligung eines L-Schalenelektrons und von Valenzelektronen spricht man von einem Si-LVV-Übergang.

Die hohe Wahrscheinlichkeit dafür, daß das freigesetzte Auger-Elektron im Festkörper inelastisch gestreut wird, begrenzt seine Nachweiswahrscheinlichkeit in einem charakteristischen Peak des Auger-Elektronenspektrums $N(E)$. Die mittlere freie Weglänge zwischen zwei inelastischen Streuprozessen beträgt für Elektronen in diesem Energiebereich etwa 2-10 Atomlagen /175/, woraus die hohe Oberflächensensitivität der AES-Methode resultiert.

Da die Auger-Linien nur eine kleine Signaländerung gegenüber dem Untergrund der Sekundär- und Rückstreuielektronen ausmachen, wird das differenzierte Auger-Spektrum dN/dE aufgenommen, in dem die Linien deutlicher hervortreten.

Die Differenz der zu jeder Linie gehörenden zwei Extrema APPH (Auger peak-to-peak height) bzw. die Fläche unter dem untergrundkorrigierten Peak im nicht-differenzierten Spektrum sind Maße für die Dichte der zu Auger-Übergängen angeregten Atome. Daraus können mit Hilfe von elementspezifischen Empfindlichkeitsfaktoren und sogenannten Matrixkorrekturtermen die in einer Probe vorliegenden Konzentrationsverhältnisse bestimmt werden. Die quantitative Auswertung der an Ni-Implantaten durchgeführten Messungen wird detailliert in /176/ beschrieben.

Um tiefenaufgelöste Information über die Probenzusammensetzung zu erlangen, wird die Probe sukzessive durch Sputtererosion (1 keV Ar⁺-Ionen, 30° zur Oberfläche, Scanfläche 2x2 mm²) abgetragen und analysiert. Die Parameter werden dabei gemäß /177/ so gewählt, daß Änderungen der Oberflächenzusammensetzung /178/ durch den Ar-Ionenbeschuß unwahrscheinlich sind. Wegen der Materialabhängigkeit der Sputterraten ist die Transformation der Sputterzeit in Sputtertiefen grundsätzlich problematisch. Einen Ausweg bietet die Korrelation von AES-Profilen zu optischen Profilen /179,180/ oder – wie hier praktiziert – zu XTEM-Analysen.

Die in dieser Arbeit dargestellten AES-Messungen wurden von A. Schönborn im Rahmen fortlaufender Untersuchungen mit einem PHI-SAM 590 Spektrometer am Institut für Spektrochemie und angewandte Spektroskopie, Dortmund, durchgeführt.

4.4 Transmissionselektronenmikroskopie (TEM)

Transmissionselektronenmikroskopische Untersuchungen wurden mit einem Philips EM 301 G Mikroskop im Beugungs- und Abbildungsmodus bei einer Beschleunigungsspannung von 100 kV durchgeführt. In den folgenden Abschnitten werden daher wichtige Aspekte der Elektronenbeugung sowie einige Abbildungsverfahren dargestellt (z.B. /181-183/).

4.4.1 Elektronenbeugung

Die Amplitude einer an den Atomen eines Kristalls elastisch gestreuten ebenen Elektronenwelle $\Phi = \Phi_0 e^{2\pi i \vec{k} \cdot \vec{r}}$ ergibt sich im Rahmen der kinematischen Theorie der Elektronenbeugung durch phasenrichtige Summation der Streubeiträge aller n Elementarzellen proportional zu

$$\Phi_g = \sum_n F_n e^{-2\pi i \vec{k}' \cdot \vec{r}_n} \quad (4.7)$$

Der Streuvektor $\vec{k}' = \vec{k}_g - \vec{k}_o$ ist die Differenz der Wellenvektoren der gestreuten und der einfallenden Welle, \vec{r}_n ist der Translationsvektor zur n-ten Elementarzelle. Ihr Streuvermögen in Richtung θ wird durch den Strukturfaktor $F_n(\theta)$ beschrieben, der sich durch phasenrichtiges Aufaddieren der Streubeiträge berechnen läßt, die von den zu der Elementarzelle gehörenden Atomen ausgehen:

$$F(\theta) = \sum_i f_i(\theta) e^{-2\pi i \vec{k}' \cdot \vec{r}_i} \quad (4.8)$$

Das winkelabhängige Streuvermögen des i-ten Atoms an der Stelle \vec{r}_i wird durch seine atomare Streuamplitude $f_i(\theta)$ beschrieben, die für alle Atomsorten tabelliert ist (z.B. /181/).

Aus Gl. 4.7 folgt, daß nur dann starke Beugungsintensität auftritt, wenn der Streuvektor \vec{k}' einem reziproken Gittervektor \vec{g}_{hkl} entspricht :

$$\vec{k}' = \vec{k}_g - \vec{k}_o = \vec{g}_{hkl} \quad (4.9)$$

Dies ist die Laue-Gleichung. Da der Betrag des reziproken Gittervektors über $|\vec{g}_{hkl}|^{-1} = d_{hkl}$ mit dem Netzebenenabstand d_{hkl} der durch die Millerindizes $\{hkl\}$ bezeichneten Netzebenenchar verknüpft ist und zwischen \vec{k}' und der Elektronenwellenlänge λ die Beziehung $|\vec{k}'|^{-1} = \lambda$ gilt, kann Gl. 4.9 in die äquivalente Bragg-Bedingung

$$2 d_{hkl} \sin \Theta_{hkl} = n \lambda \quad (4.10)$$

umgeformt werden. Hierin ist n die Beugungsordnung und Θ_{hkl} der Bragg-Winkel, der zwischen dem einfallenden Strahl \vec{k}_o und der Netzebene $\{hkl\}$ gemessen wird.

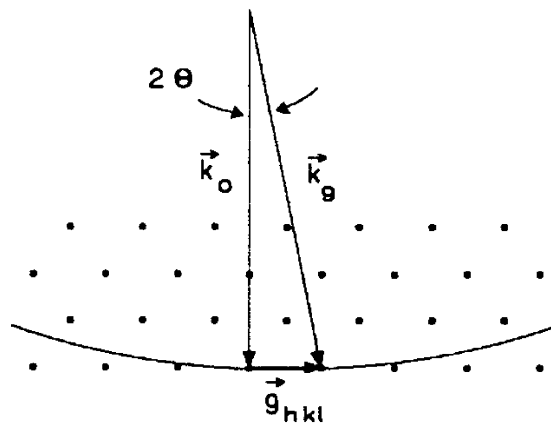


Abb. 4.9

Ewald-Konstruktion für die Elektronenbeugung.

Die Laue-Gleichung läßt sich mit Hilfe der Ewald-Konstruktion veranschaulichen. Dazu wird, wie in Abb. 4.9 dargestellt, im reziproken Raum eine Kugel mit Radius $|\vec{k}_o|$ um den Fußpunkt des die einfallende Welle beschreibenden Vektors \vec{k}_o gelegt. \vec{k}_o endet auf einem reziproken Gitterpunkt. Zu jedem weiteren reziproken Gitterpunkt, den die Ewald-Kugel berührt, gibt es dann einen Wellenvektor \vec{k}_g , für den die Laue-Gleichung erfüllt ist. Wegen der vergleichsweise geringen Krümmung der Ewald-Kugel ($|\vec{k}_o| = \lambda^{-1} = (0.037 \text{ \AA})^{-1} = 27 \text{ \AA}^{-1}$ für 100 kV Elektronen) steht \vec{k}_o nahezu senkrecht zu \vec{g}_{hkl} , d.h. die Ewald-Kugel berührt eine reziproke Gitterebene. Somit gibt es i.a. mehrere derart zum Elektronenstrahl orientierte Netzebenen, so daß die Gln. 4.9 und 4.10 im Rahmen eines zulässigen Anregungsfehlers erfüllt sind.

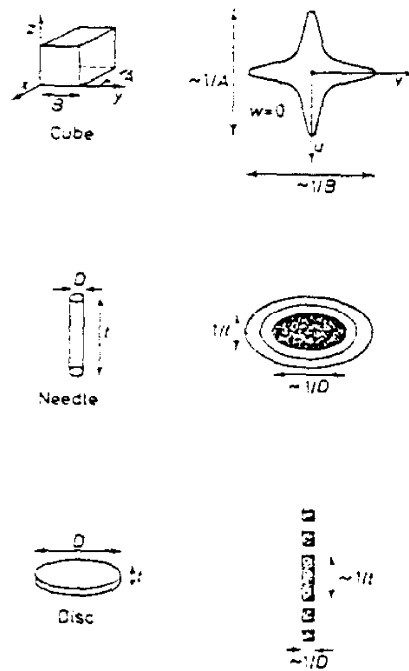


Abb. 4.10

Gegenüberstellung verschiedener Kristallformen und der zugehörigen Intensitätsverteilung (schematisch) im reziproken Raum (nach /181/).

Damit dann entsprechende Beugungsreflexe beobachtet werden können, muß der Strukturfaktor $F(\theta)$ für den Beugungswinkel θ_{hkl} von Null verschieden sein, d.h. die an den Atomen einer Elementarzelle gestreuten Elektronenwellen dürfen in dieser Richtung nicht vollständig destruktiv interferieren (Strukturfaktorverbot). Nach Gl. 4.8 berechnete Strukturfaktoren sind für hier relevante Kristallstrukturen in Anhang A tabelliert.

Nach Gl. 4.7 wird die Amplitude der Streuwelle durch die Fouriertransformierte des Kristalls beschrieben. Demzufolge ist die Intensitätsverteilung im reziproken Raum für einen endlich ausgedehnten Kristall nicht unendlich scharf auf diskrete Ausbreitungsrichtungen \vec{k}_g beschränkt, geringe Fehlorientierungen (Anregungsfehler) sind somit erlaubt.

Insbesondere folgt aus Gl. 4.7, daß die Intensität der Beugungsreflexe von plättchen- oder stäbchenförmigen Kristalliten stäbchen- bzw. plättchenartig im \vec{k} -Raum verteilt ist (Abb. 4.10). Dabei entspricht im Falle eines plättchenförmigen Kristalls der Dicke t die Halbwertsbreite des Intensitätshauptmaximums etwa $1/t$ (Abb. 4.11). Die Richtung, in der die stäbchenartige Verbreiterung des Reflexes auftritt, liegt parallel zur

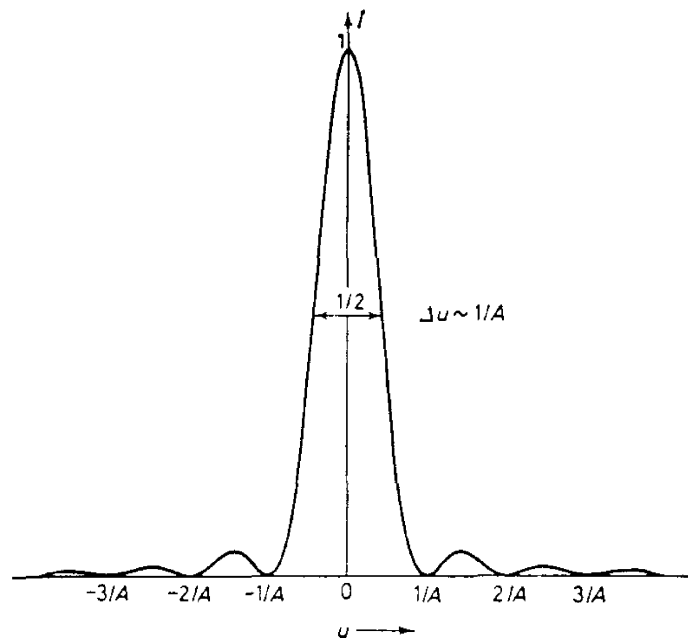


Abb. 4.11

Normierte Intensitätsverteilung für ein Kristallplättchen der Dicke A in Richtung des reziproken Gittervektors \vec{u} parallel zur Plättchennormalen $/181/$. Da die Intensität in den ersten Nebenmaxima nur etwa 5% vom Wert im Hauptmaximum beträgt, sind die Nebenmaxima meist nicht sichtbar.

Normalen des Plättchens. Somit verursachen Plättchen je nach ihrer Orientierung bezüglich der von der Ewald-Kugel berührten reziproken Gitterebene (Abb. 4.12) im Beugungsbild Streifen (streaks, spikes) oder zusätzliche Reflexe, wodurch z.T. der Eindruck einer Reflexaufspaltung (splitting) entsteht. Die von dünnen Kristallplättchen hervorgerufenen

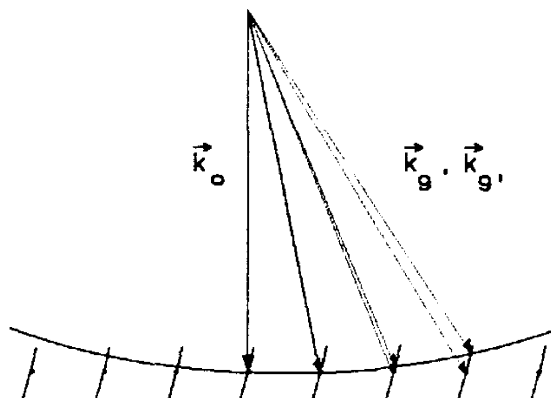


Abb. 4.12

Darstellung der Reflexaufspaltung bei einem dünnen Kristallplättchen, dessen Flächennormale schräg zum einfallenden Elektronenstrahl liegt, mit Hilfe der Ewald-Konstruktion.

Reflexe sind dadurch gekennzeichnet, daß sich — im Gegensatz zu regulären Spots — bei einer Probenkipfung deren Position ändert, aber ihre Intensität vergleichsweise wenig variiert. Gleichungen zur Berechnung der Richtung, unter der bei vorgegebener Probenorientierung und Plättchenlage eine Reflexaufspaltung im Beugungsbild zu erwarten ist, werden in Anhang D angegeben.

Die in einen Reflex gebeugten Elektronen können weiteren elastischen (oder auch inelastischen) Streuprozessen unterliegen. Von jedem Reflex kann somit wie von einem Primärstrahl ein vollständiges Beugungsbild erzeugt werden, das dem primären Beugungsbild überlagert ist. Diese sogenannte Umweganregung kann beispielsweise zum Auftreten von Beugungsreflexen führen, für die gemäß der kinematischen Theorie das Strukturfaktorverbot gilt. Eine exakte Beschreibung der Intensitätsverhältnisse gibt dann nur die dynamische Theorie der Elektronenbeugung. Allerdings gelingt eine qualitative Deutung solcher Beugungsmuster hinsichtlich der zugrundeliegenden Kristallstruktur i.a. durch Überlagerung "kinematischer" Beugungsbilder.

Aus dem in einer Beugungsaufnahme zu messenden Abstand R_{hkl} eines Reflexes zum Primärstrahl läßt sich gemäß $\tan(2\theta_{hkl}) = R_{hkl} / L$ der Bragg-Winkel θ_{hkl} bestimmen, aus dem sich gemäß Gl. 4.10 der Netzebenenabstand d_{hkl} des Beugungsobjektes ergibt. Dabei bezeichnet L die eingestellte Beugungslänge des Mikroskops, die dem virtuellen Abstand (≈ 50 cm) zwischen Probe und Photoplatte bei geradlinigem Strahlengang entspricht. L hängt von der Anregung der Mikroskoplinsen ab und muß daher für jede Analyse neu mit Hilfe von Beugungsaufnahmen an einer bekannten Kristallstruktur bestimmt werden. Bei der Untersuchung implantierter Siliziumproben bietet sich hierfür die Verwendung der Siliziummatrixreflexe als Referenz an. Die Genauigkeit in der Bestimmung von Netzebenenabständen hängt u.a. von der Intensität, Breite und Anzahl der auf einer Aufnahme auszuwertenden Reflexe ab und liegt hier zwischen etwa 0.5 und 1%.

Im Rahmen dieser Fehlergrenzen lassen sich Silizium (kubisch, Diamantstruktur) und NiSi_2 (kubisch, CaF_2 -Struktur) aufgrund ihrer ähnlichen Gitterkonstanten nicht durch TEM-Beugungsanalysen ihrer Netzebenenabstände unterscheiden. Allerdings gelingt die Unterscheidung zwischen Si und NiSi_2 anhand der unterschiedlichen Reflexe, die entsprechend ihrer verschiedenen Strukturfaktoren (Anhang A) erlaubt sind.

4.4.2 Abbildungsverfahren und Kontraste

Im folgenden werden die für diese Arbeit wichtigen Verfahren der Hellfeld- und Dunkelfeldabbildung skizziert.

Für eine Hellfeldabbildung wird in Höhe der ersten Beugungsebene des Mikroskops eine Objektivaperturblende eingeführt und um den Primärstrahl zentriert (Abb. 4.13). Somit können nur solche Elektronen zur Abbildung beitragen, die nicht zuvor abgelenkt werden (Beugungskontrast). Probenbereiche, in denen lokal z.B. aufgrund einer vorhandenen Ausscheidung oder des Verzerrungsfeldes eines Gitterdefekts die Bragg-Bedingung erfüllt ist, erscheinen daher dunkel.

Kippt man nun den Elektronenstrahl so, daß ein ausgewählter Beugungsreflex auf der optischen Achse des Mikroskops liegt, so erhält man eine Dunkelfeldabbildung (Abb. 4.13). Hierbei erscheinen nur solche Probenbereiche hell, die zur Beugung des Primärstrahls in den zur Abbildung

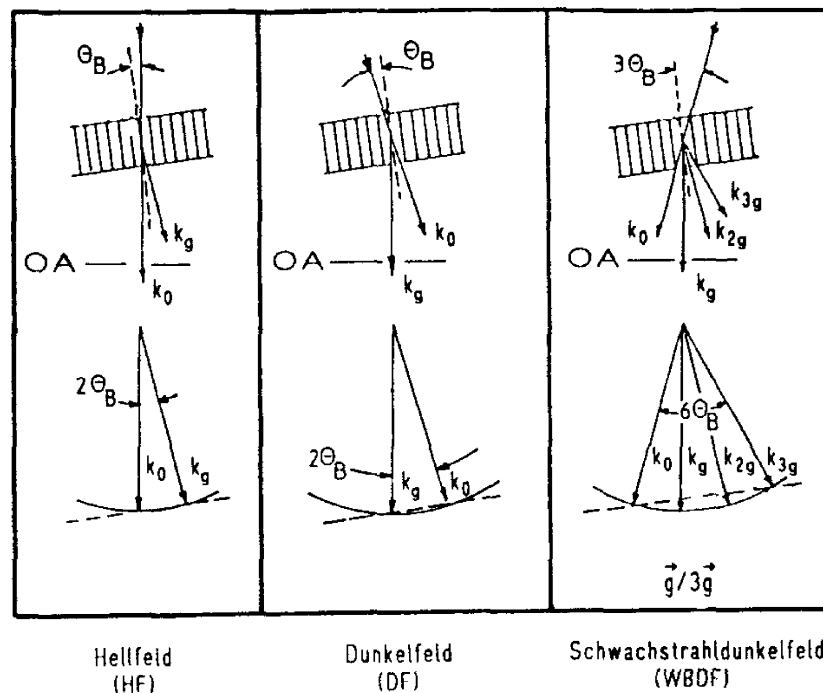


Abb. 4.13

Schematische Darstellung des Strahlenganges durch Probe und Objektivaperturblende (OA) im realen Raum sowie der entsprechenden Ewald-Konstruktionen im reziproken Raum für die Abbildung mit Hilfe der Hellfeld-, Dunkelfeld- und Schwachstrahldunkelfeldtechnik (nach [184]).

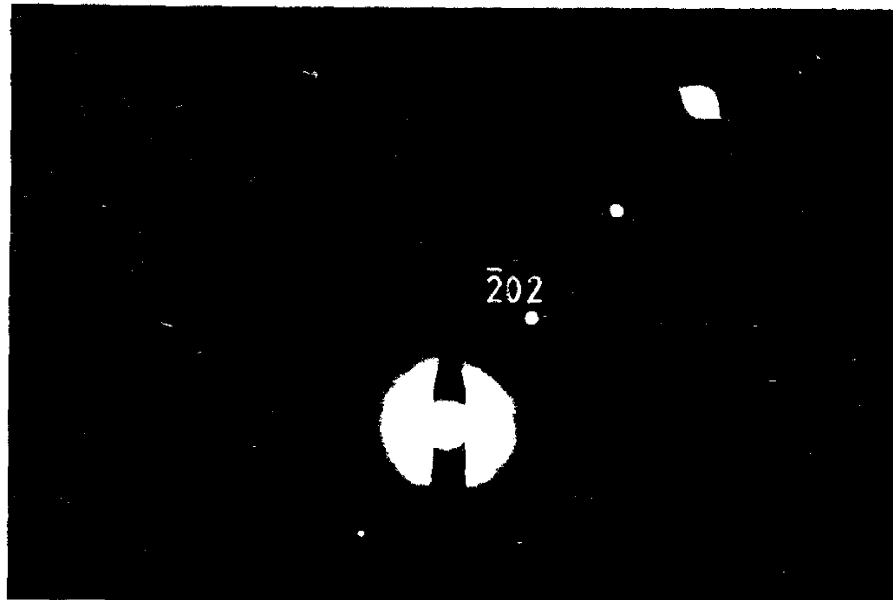


Abb. 4.14

Beugungsbild eines Siliziumkristalls unter den Einstellbedingungen für eine WBDF- $\vec{g}/3\vec{g}$ Aufnahme mit $\vec{g} = (\bar{2}02)$.

verwendeten Reflex beitragen. Folglich lassen sich durch Dunkelfeldabbildungen die beobachteten Reflexe mit zugehörigen Probenbereichen korrelieren. Darüberhinaus ergibt die gegenüber dem Hellfeld erfolgte Kontraständerung Aufschluß über vorliegende Gitterschäden.

Besonders deutliche Kontraste erzeugen beispielsweise Versetzungen bei Anwendung der Schwachstrahldunkelfeldmethode (weak-beam dark field, Abb. 4.13) /185/. Bei dieser Dunkelfeldtechnik wird ein schwach angeregter Reflex \vec{g} zur Abbildung benutzt, während möglichst nur ein weiterer Reflex höherer Ordnung (z.B. $3\vec{g}$) stark angeregt ist. Eine solche Einstellung läßt sich bei nicht zu stark geschädigten Proben durch eine geeignete Probenorientierung und Strahlklippung erzielen. Das Beugungsbild einer zur Abbildung mit der WBDF-Technik vorbereiteten Probe wird in Abb. 4.14 gezeigt.

5. Probenherstellung und Probenpräparation

5.1 Implantation

Die in dieser Arbeit untersuchten Proben wurden am Dynamitron-Tandem-Laboratorium (DTL) an der Universität Bochum implantiert. Hier kann ein gut fokussierter Strahl ($\varnothing \lesssim 2 \text{ mm}$) von $^{58}\text{Ni}^{2+}$ -Ionen mit einer Energie von 6 MeV erzeugt werden. Der Strahl ist über mehrere Tage stabil und es werden Strahlströme von einigen μA erreicht, so daß wesentliche Voraussetzungen zur Durchführung von Hochdosisimplantationen erfüllt sind.

Als Targetmaterial wurden (111)-orientierte Siliziumkristalle von 300 - 380 μm Dicke verwendet. Die Siliziumwafer sind phosphordotiert und haben einen spezifischen Ausgangswiderstand von 85 - 110 bzw. $\geq 2500 \Omega\text{cm}$. Um Channelingeffekte zu vermeiden, wird die Bestrahlung unter einem Winkel von 7° zur Oberflächennormalen der Probe ausgeführt. Die Siliziumscheibe befindet sich auf einer Kupferhalterung, deren Temperatur durch Kühlen mit Flüssigstickstoff und elektrisches Gegenheizen auf $\pm 1 \text{ K}$ konstant gehalten werden kann. Zur Temperaturmessung und Regelung der elektrischen Heizung dient ein in die Probenhalterung eingelassener Pt100 Meßwiderstand. Um guten Wärmekontakt zu gewährleisten, wird Vakuumfett als Kontaktmittel zwischen Probe und Probenhalter eingesetzt. Mit dieser Anordnung wurden Implantationen bei Temperaturen von 125 - 450 K durchgeführt.

Zur Erzeugung homogen bestrahlter Probenflächen wurde ein elektrostatischer Strahlwobblers entwickelt /186/. Dieser besteht aus einem quarzstabilisierten Dreieck-Hochspannungsgenerator ($\pm 2 \text{ kV}$) und zwei Plattenpaaren von 40 cm Länge und 3 cm Plattenabstand für die horizontale und vertikale Ablenkung. Die Flugstrecke zwischen den Plattenmittelpunkten und der Probe ist so groß ($\sim 2 \text{ m}$), daß Strahlflecke von 1 cm Kantenlänge bereits bei Ablenkwinkeln von weniger als 0.2° erzielt werden. Strahlfleckgröße und -form werden mit Hilfe einer Geometrieblende im Abstand von $\sim 20 \text{ cm}$ zur Probe festgelegt.

Ist das Verhältnis der Wobble-Frequenzen für die horizontale und die vertikale Ablenkung eine rationale Zahl, so beschreibt der Ionenstrahl auf der Probe eine Lissajous-Figur aus parallelen, äquidistanten Linien /187/.

Bei den verwendeten Frequenzen von 912 Hz (horizontal) und 900 Hz (vertikal) ergibt sich bei einer Strahlfleckgröße von $7.5 \times 7.5 \text{ mm}^2$ ($4.3 \times 7.5 \text{ mm}^2$) ein Linienabstand von 0.14 mm (0.10 mm) bei einer Bildwiederholungsrate von 24 Hz. Dadurch wird auch bei den für Niedrigdosisimplantationen auftretenden Bestrahlungszeiten von wenigen Sekunden eine hinreichende Dosishomogenität (besser als 5%) erzielt.

Die Auslegung der gesamten Implantationskammer als Faradaycup ermöglicht eine Berechnung der Dosis D durch zeitliche Integration des von der Kammer abgeführten Stromes I und durch eine exakte Bestimmung der implantierten Fläche F:

$$D = \frac{\int I dt}{F e z} \quad (5.1)$$

e : Elementarladung

z : Ladungszustand des Ions

Die Flächenbestimmung erfolgt durch orts aufgelöste Reflektivitätsmessungen von Niedrigdosisproben, bei denen die schädigungsbedingte Reflektivitätserhöhung proportional zur Dosis ist. Der Proportionalitätsfaktor ergibt sich aus der über die bestrahlte Fläche integrierten Gesamtschädigung und der insgesamt deponierten Teilchenzahl. Durch Normierung kann somit das optische Signal in die Dosis umgerechnet werden. Als Ergebnis erhält man die räumliche Verteilung der Dosis, die für eine Dimension in Abb. 5.1 dargestellt ist. Unter der Annahme eines vernachlässigbar kleinen Fehlers bei der Bestimmung des Stromes beträgt der Fehler der Dosisangaben $\pm 5\%$.

Die in dieser Arbeit beschriebenen Untersuchungen umfassen einen Dosisbereich von $3 \times 10^{12} \text{ Ni/cm}^2$ bis $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$. Um Proben innerhalb angemessener Implantationszeiten (5 s – 10 h) fertigstellen zu können, muß die Implantation bei unterschiedlichen Strahlströmen (0.1 – 4.0 μA) durchgeführt werden. Einige Implantationen gleicher Dosis wurden bei unterschiedlichen Strahlströmen wiederholt, um mögliche Stromdichteeffekte abschätzen zu können.

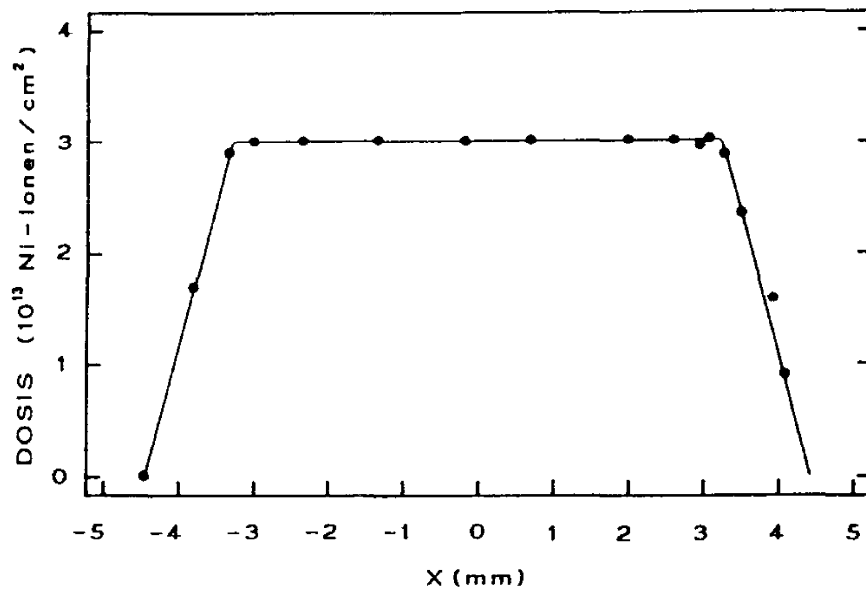


Abb. 5.1

Dosisverteilung im Strahlfleck einer Niederdosisprobe ($T_i = 300$ K; $D = 3 \times 10^{13}$ Ni/cm²) in horizontaler Richtung.

5.2 Tempern

Einige Proben wurden nach der Implantation in fließender Argonatmosphäre isotherm bei 800 °C getempert. Die gereinigten Proben werden dazu auf einem Siliziumträger in einen vorgeheizten Quarzrohrföfen (Heraeus RoK/F 10/60) gebracht. Die Zeiten für das Einführen sowie die Entnahme der Probe aus dem Ofen liegen bei etwa 2 min, die Temperzeiten betragen 5 bzw. 20 h.

5.3 Präparation

Schrägschliffpräparation

Zur Messung von Tiefenprofilen der optischen Reflektivitätsänderung und des Ausbreitungswiderstandes sowie für tiefenaufgelöste transmissions-elektronenmikroskopische Untersuchungen in Aufsichtsperspektive werden Scheibchen von 3 mm Durchmesser mit einem Ultraschallbohrer ausgebohrt und auf einer rotierenden Quarzplatte unter fließendem Wasser schräg angeschliffen. Die verwendete Schleifapparatur wird detailliert in /159/ beschrieben. Durch den Schrägschliff wird die implantierte Zone auf der Schlifffläche freigelegt und erscheint um den Faktor $1/\sin \alpha$ gestreckt (Abb.5.2). Der Schliffwinkel α wird mit Hilfe eines Nomarski-Interferenz-Kontrastverfahrens /188/ mit einer Genauigkeit von $\pm 0.01^\circ$ bestimmt, typische Schliffwinkel betragen etwa 1.3° . Die so vorbereiteten Proben können optisch und elektrisch untersucht werden.

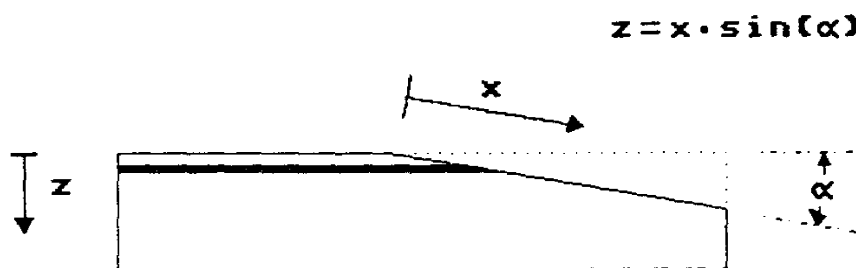


Abb. 5.2

Zusammenhang zwischen der Tiefe z und dem Abstand x von der Schliffkante.

Proben für die TEM-Analyse müssen zusätzlich bis zur Durchstrahlbarkeit für 100 keV Elektronen gedünnt werden. Für gute Kontraste sind bei reinem Silizium Probendicken von maximal 1000 \AA erforderlich, im Falle hoher Nickelkonzentrationen sollte die Probendicke deutlich geringer sein. Mit Hilfe eines Düsenätzverfahrens /189/ wird unter Verwendung eines gekühlten Säuregemisches aus HF und HNO_3 im Verhältnis 1 : 6 von der

Probenrückseite her eine kalottenförmige Vertiefung in die Probe geätzt, bis im Bereich der implantierten Schicht ein Loch durchbricht (Abb. 5.3 a). Der Ätzvorgang wird durch Eintauchen der Probe in destilliertes Wasser gestoppt.

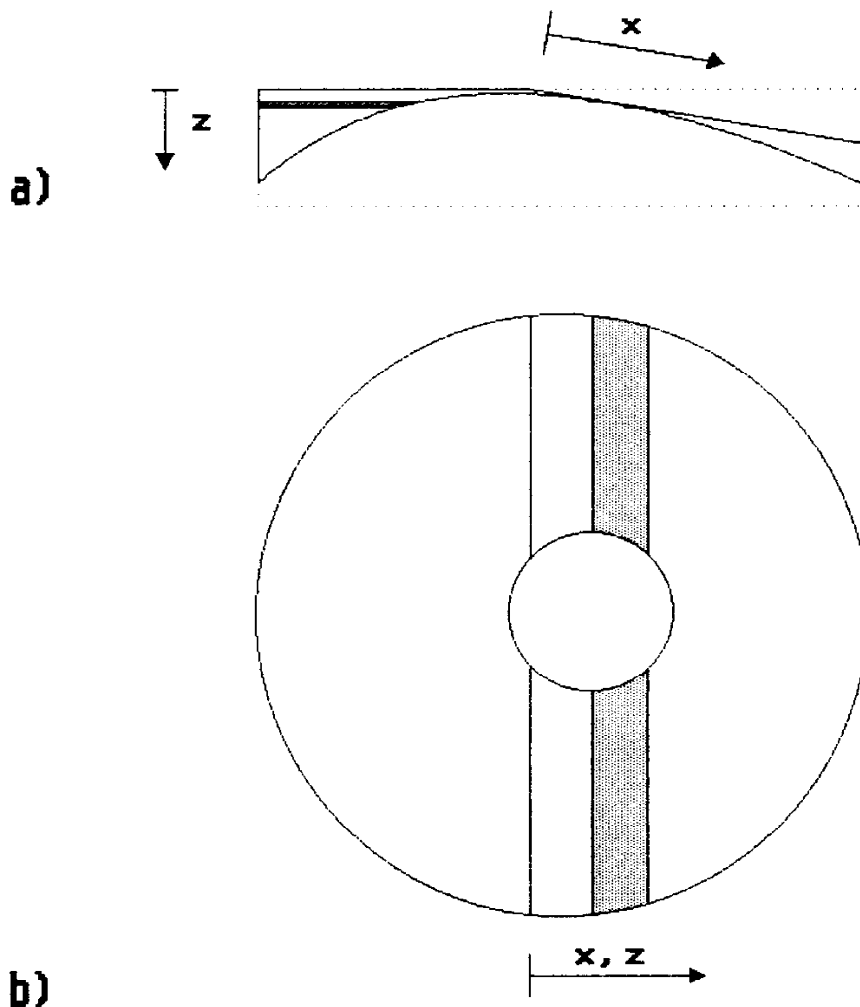


Abb. 5.3

Schematische Darstellung einer schräggeschliffenen und anschließend geätzten Probe; (a) im Querschnitt; (b) in Aufsicht.

Der das Ätzloch umgebende Probenrand ist keilförmig und enthält in der Regel ausreichend dünne Stellen, so daß entlang des Lochrandes (Abb. 5.3 b) tiefen aufgelöste TEM Untersuchungen möglich sind.

Zur Verbesserung der Durchstrahlbarkeit im Bereich des Maximums der Nickelkonzentration wurden einige Hochdosisimplantate zusätzlich von der geätzten Probenseite aus mit 8 keV Ar^+ -Ionen gesputtert.

Cross-section - Präparation

Im Rahmen verschiedener Arbeiten /190-192/, die sich mit der Entwicklung und Verbesserung von elektronenmikroskopischen Querschnitts-Präparationstechniken befassen, wurden unterschiedliche Verfahren zur Vorbereitung von Proben für XTEM-Untersuchungen angewandt. Die in dieser Arbeit betrachteten tiefen Implantationen stellen besondere Anforderungen an die Präparation hinsichtlich der Breite der zu durchstrahlenden Bereiche. Im folgenden wird das Verfahren skizziert, das sich durch eine hohe Erfolgsquote sowie große durchstrahlbare Bereiche auszeichnet.

Mit Hilfe einer Diamantsäge werden aus einem Strahlfleck kleine Quader ausgesägt (Abb. 5.4 a) und paarweise mit Epoxidharz zusammengeklebt (Abb. 5.4 b). Um schmale Klebefugen zwischen den Siliziumklötzchen zu

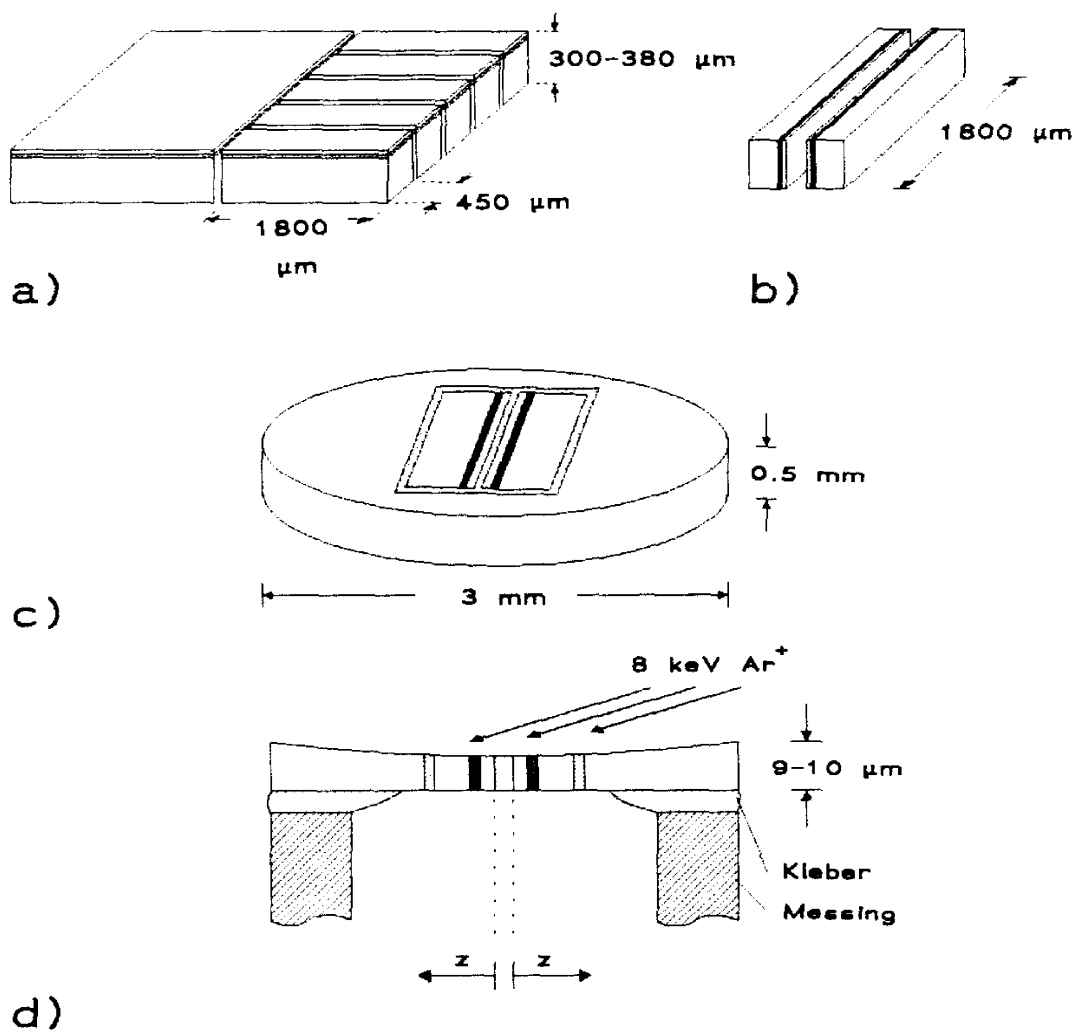


Abb.5.4

Verschiedene Stadien (a)-(d) der Cross-section-Präparation einer Probe.

erhalten, werden diese während des Klebevorganges mit einer Pinzette gegeneinander gepreßt. Das Quaderpaar wird in ein vorbereitetes Silizium- oder Messing- "töpfchen" von 3 mm Durchmesser und etwa 500 µm Dicke eingeklebt (Abb. 5.4 c), so daß die z-Richtung des Implantats parallel zur Oberfläche des "Töpfchens" liegt. Dieses Scheibchen wird zunächst einseitig poliert, anschließend von der zweiten Seite aus mit einem Planschliffgerät auf Naßschleifpapier gedünnt und bis zu einer Restdicke von 9 - 10 µm poliert. Zur Erhöhung der mechanischen Stabilität wird ein Verstärkungsring aus Messing aufgeklebt (Abb 5.4 d), der ein Ablösen der erzeugten Folie vom Schleifhalter und anschließendes Reinigen mit Aceton ermöglicht. Durch Sputtern (5 - 10 h) mit 8 keV Ar⁺-Ionen unter Winkeln von 6 - 7° zur Oberfläche werden die Präparate bis zur Durchstrahlbarkeit gedünnt.

6. Ergebnisse und Diskussion

Die Darstellung der Untersuchungsergebnisse ist wie folgt gegliedert. Nach Untersuchungen zum Fremdatomeinfluß von Nickel auf die Reflektivitätsänderung (Kap. 6.1) werden in Kap. 6.2 zunächst optische Messungen zur Dosis- und Temperaturabhängigkeit der Strahlenschädigung von Silizium durch 6 MeV Ni-Ionen vorgestellt. Die Schädigungsanalysen wurden für Dosen zwischen 3×10^{12} und 2×10^{17} Ni/cm² und Temperaturen von 125 bis 450 K in Zusammenarbeit mit R. Domres /193,194/ durchgeführt. Anschließend werden die Ergebnisse elektronenmikroskopischer Untersuchungen an Hochdosisimplantaten zusammen mit weiteren optischen sowie elektrischen Messungen dargestellt. Strukturelle Änderungen durch Temperbehandlungen sowie die Auswirkungen auf die optischen und elektrischen Eigenschaften sind Inhalt des letzten Abschnitts (Kap. 6.3). Die darin vorgestellten TEM-Analysen erfolgten unter Mitarbeit von T. Klassen /192/.

Die Ergebnisse werden abschnittsweise diskutiert, gegebenenfalls auch unter Verweis auf weiterführende Diskussionen an anderer Stelle. Eine Zusammenfassung wird in Kap. 7 gegeben.

6.1 Einfluß von Nickel auf die optische Reflektivität

Zur Abschätzung des Dosisbereiches, in dem Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung als reine Strahlenschädigungsprofile interpretiert werden können, muß der Einfluß der abgelagerten Nickelatome auf das optische Verhalten ermittelt werden (s. Kap. 4.1.2). Dafür wurden Tieftemperaturimplantate im Dosisbereich zwischen 2×10^{14} und 3×10^{17} Ni/cm² herangezogen, bei denen sich das Maximum der Ionenverteilung innerhalb einer amorphen Schicht befindet und somit die Reflektivitätsänderung durch Fremdatome einfach von dem konstanten Beitrag der Strahlenschäden separiert werden kann.

Abb. 6.1 zeigt ein Beispiel für eine Dosis von 1×10^{17} Ni/cm². Die amorphe Schicht erstreckt sich von der Oberfläche bis in eine Tiefe von 3.9 ± 0.1 µm und zeigt nahe der Oberfläche ein für ia-Si Schichten

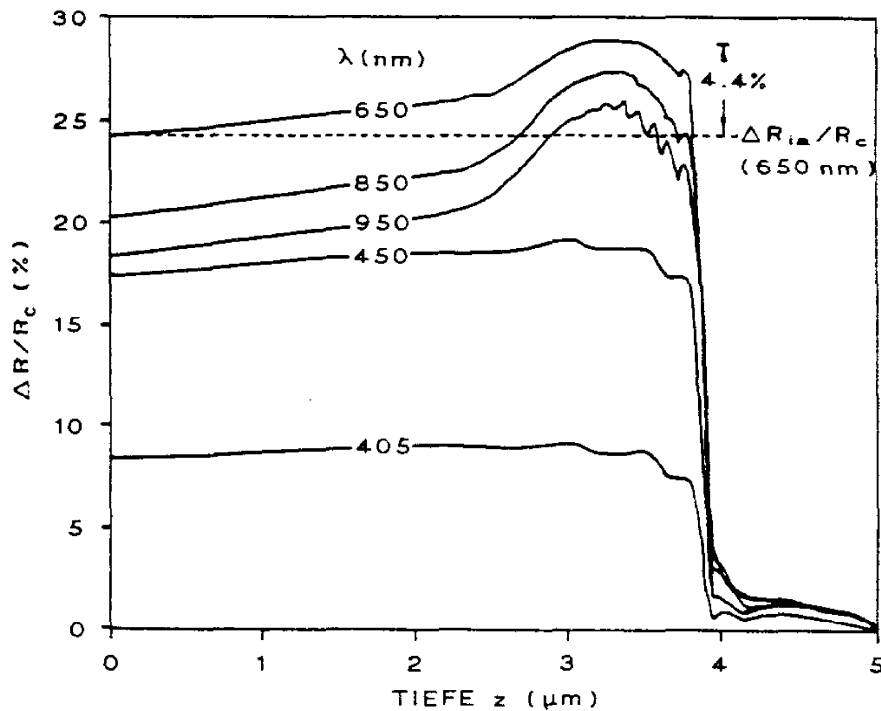


Abb. 6.1

Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung für verschiedene Wellenlängen ($D = 1 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i \leq 300 \text{ K}$).

typisches Spektralverhalten (vgl. Abb. 4.3). Die Abweichungen der Reflektivität von dem wellenlängenspezifischen Sättigungswert reiner ia-Si Schichten sind auf das deponierte Nickel zurückzuführen, dessen Konzentrationsmaximum in einer Tiefe von $3.3 \pm 0.15 \mu\text{m}$ liegt. Der fremdatombedingte Beitrag zur Reflektivitätsänderung nimmt im untersuchten Spektralbereich monoton mit der Wellenlänge zu. Oberhalb von 500 nm zeigt sich im Bereich des Ionenprofilmaximums eine deutliche Erhöhung des optischen Signals, bei 650 nm bewirkt das Nickel dort einen Beitrag von 4.4 % zusätzlich zu $\Delta R_{ia}/R_c$.

Für diese, bei der Schädigungsanalyse benutzte Wellenlänge beträgt die kleinste Dosis, bei der ein Einfluß des Nickels auf das optische Signal erkennbar ist, $5 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$.

Nimmt man vereinfachend an, daß der nickelbedingte Beitrag zur Reflektivitätsänderung unabhängig vom Schädigungszustand der Siliziummatrix ist, so läßt sich für Dosen bis zu $2 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ die Strahlenschädigung aus Tiefenprofilen der Reflektivitätsänderung im Rahmen eines

maximalen Fehlers $\Delta s/s$ von etwa 5 % (bei $s \approx 0.05$) nach Gl. 4.2 bestimmen. Bei größeren Dosen führt der Fremdioneneinfluß auf das optische Signal zu einer zunehmenden Überschätzung des Schädigungsgrades. Diese Abweichung kann dann abgeschätzt werden, indem man den an amorphen Proben gemessenen Fremdatombeitrag zu $\Delta R/R_c$ als Einfluß des Nickels auf die Reflektivitätsänderung auch bei nicht amorphisierten Proben gleicher Dosis ansieht. Dieser Ansatz wird dadurch unterstützt, daß auch bei nicht amorphisierten Proben für Wellenlängen von 500 bis 950 nm in Bereichen hoher Nickelkonzentration eine *Erhöhung* der Reflektivität zu beobachten ist, die ebenfalls mit zunehmender Wellenlänge monoton ansteigt (s. Kap. 6.2.7).

6.2 Der implantierte Zustand

6.2.1 Tiefenverteilung von Strahlenschäden

Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung wurden für Implantationstemperaturen von 125 bis 450 K über einen weiten Dosisbereich gemessen. Abb. 6.2 zeigt exemplarisch für Temperaturen von 125 und 400 K die daraus bestimmten Tiefenprofile der Strahlenschädigung bei verschiedenen Dosen.

Einige der in Abb. 6.2 (b) enthaltenen Profile (400 K) können wegen des oben diskutierten Nickel-Beitrags zur optischen Reflektivitätsänderung nicht als reine Strahlenschädigungsprofile angesehen werden. Die Profilformen sind jedoch aufgrund des vergleichsweise hohen Schädigungsbeitrags nur so schwach beeinflusst, daß dies im Rahmen der sich anschließenden qualitativen Betrachtung vernachlässigt werden kann.

Bei Temperaturen von 125 – 300 K und Dosen bis zu $1 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ lassen sich Strahlenschäden im Bereich zwischen der Oberfläche und einer Tiefe von etwa $4.5 \mu\text{m}$ nachweisen. Das Strahlenschädigungsmaximum liegt in einer Tiefe von $R_d = 3.0 \pm 0.1 \mu\text{m}$.

Bei Dosen bis etwa $2 \times 10^{13} \text{ Ni/cm}^2$ sind die Profilformen für alle Targettemperaturen einheitlich, die Schädigung nimmt in allen Tiefen proportional mit der Dosis zu.

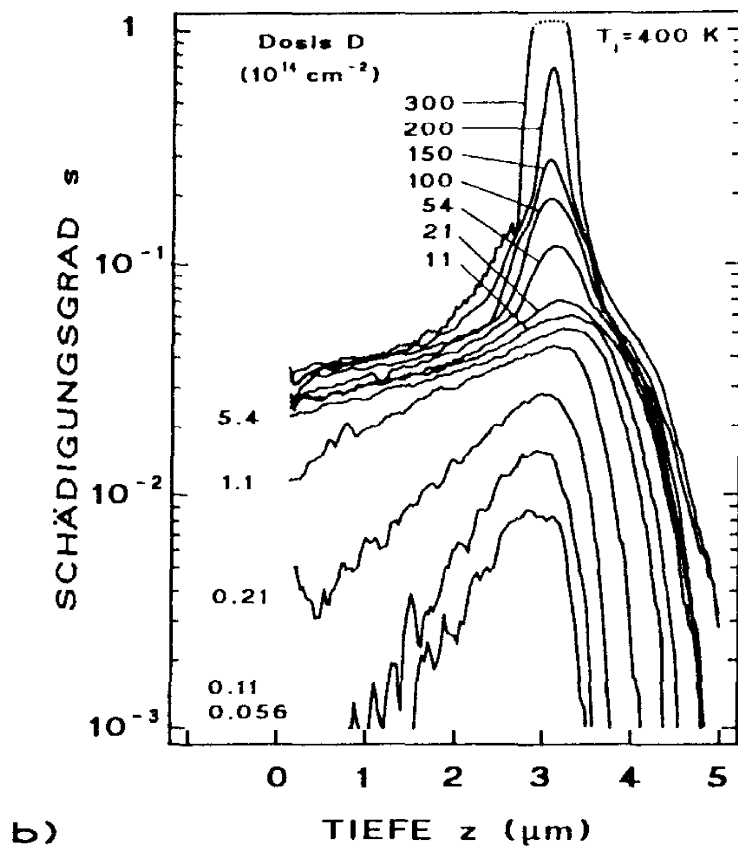
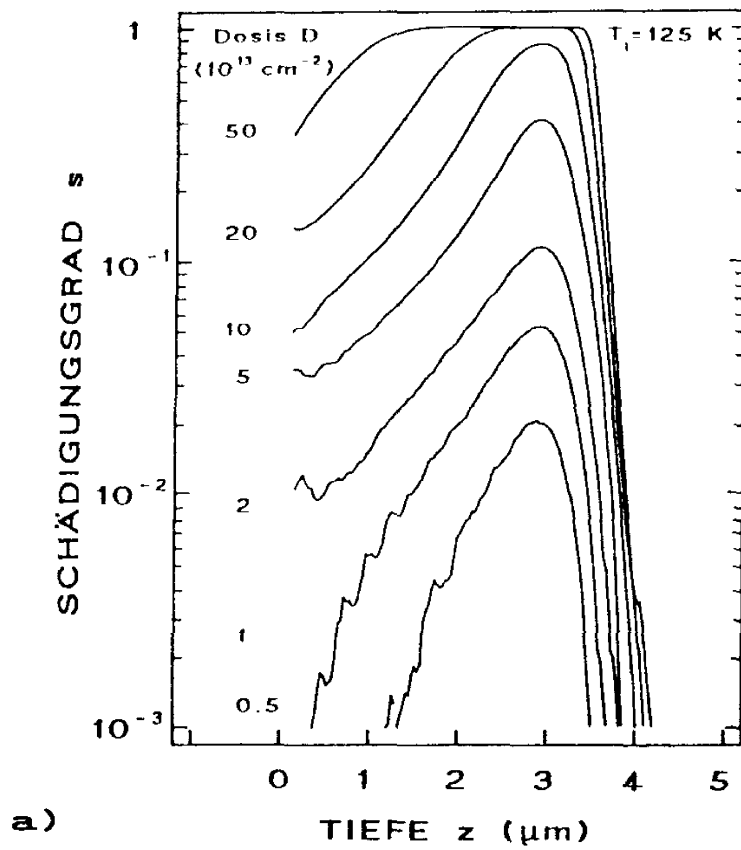


Abb. 6.2
Tiefenprofile des
optisch bestimmten
Schädigungsgrades
nach 6 MeV Ni-
Implantation bei
125 K (a) bzw.
400 K (b).

Dieses Verhalten deutet darauf hin, daß in jeder Tiefe die von verschiedenen Stoßkaskaden erzeugten Defekte aufgrund genügend weiter räumlicher Trennung nicht miteinander wechselwirken können. Die von jedem Ion erzeugte Schädigung hängt somit in erster Linie von der Stärke des nuklearen Energieverlustes ab, so daß die Position des Schädigungsmaximums $R_d = 3.0 \pm 0.1 \text{ } \mu\text{m}$ als Lage des nuklearen Bremskraftmaximums anzusehen ist. Diese Tiefe, sowie die experimentell bestimmte Lage des Ni-Ionenmaximums bei $3.3 \pm 0.15 \text{ } \mu\text{m}$ (Kap. 6.1), befinden sich in zufriedenstellender Übereinstimmung zu den durch TRIM-Simulationen berechneten Werten von $R_d^{\text{TRIM}} = 2.82 \text{ } \mu\text{m}$ bzw. $R_{\text{max}}^{\text{TRIM}} = 3.16 \text{ } \mu\text{m}$ (Kap. 2.2).

Bei Dosen oberhalb $\sim 2 \times 10^{13} \text{ Ni/cm}^2$ wächst die Schädigung zunächst im Profilmaximum, dann auch in kleineren und größeren Probentiefen überproportional mit der Dosis, woraus sich zunächst etwas spitzere Profilformen ergeben. Bei einer Dosis von $1 - 2 \times 10^{14} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 125 \text{ K}$) wird im Bereich des Strahlenschädigungsmaximums Schädigungssättigung durch Amorphisierung erreicht. Eine weitere Dosissteigerung führt zu einer Verbreiterung der amorphen Schicht in größere und kleinere Tiefen.

Bei höheren Targettemperaturen (350 und 400 K) und Dosen bis zu $3 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ erstreckt sich die geschädigte Zone von der Oberfläche bis in eine Tiefe von etwa $5 \text{ } \mu\text{m}$ (Abb. 6.2 b). Für $D \leq 2 \times 10^{13} \text{ Ni/cm}^2$ ist der erreichte Schädigungsgrad bei gleichen Dosen aber höheren Temperaturen in allen Tiefen wegen der stärkeren Ausheilung der in jeder Stoßkaskade erzeugten Defekte geringer. Im Dosisintervall von $\sim 2 \times 10^{13} \text{ Ni/cm}^2$ bis $\sim 2 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ nimmt der Schädigungsgrad im Bereich des Maximums unterproportional zur Dosis zu, während die Schädigung in kleineren Tiefen zunächst noch unverändert, dann jedoch auch hier vermindert stark ansteigt. Daraus resultieren vorübergehend sehr flache Tiefenverteilungen der Schädigung. Oberhalb einer Dosis von $\sim 2 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ wächst die Schädigung – ähnlich wie bei den kleineren Temperaturen – im Bereich des Schädigungsmaximums überproportional zur Dosis. Dagegen steigt der Schädigungsgrad in den übrigen Tiefenbereichen weiterhin schwach an, so daß sich insgesamt Profile mit deutlich ausgeprägten Maxima ergeben. Bei Dosen zwischen 2 und $3 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ tritt im Bereich des Schädigungsmaximums Sättigung durch Amorphisierung ($s = 1$) ein. Im Bereich der amorphen Schicht bei $3 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ ergibt sich durch den fremdatombedingten Beitrag zu dem zugrunde liegenden Reflektivitätsprofil eine scheinbare Schädigung $s > 1$, das Schädigungsprofil ist daher an dieser Stelle gepunktet dargestellt.

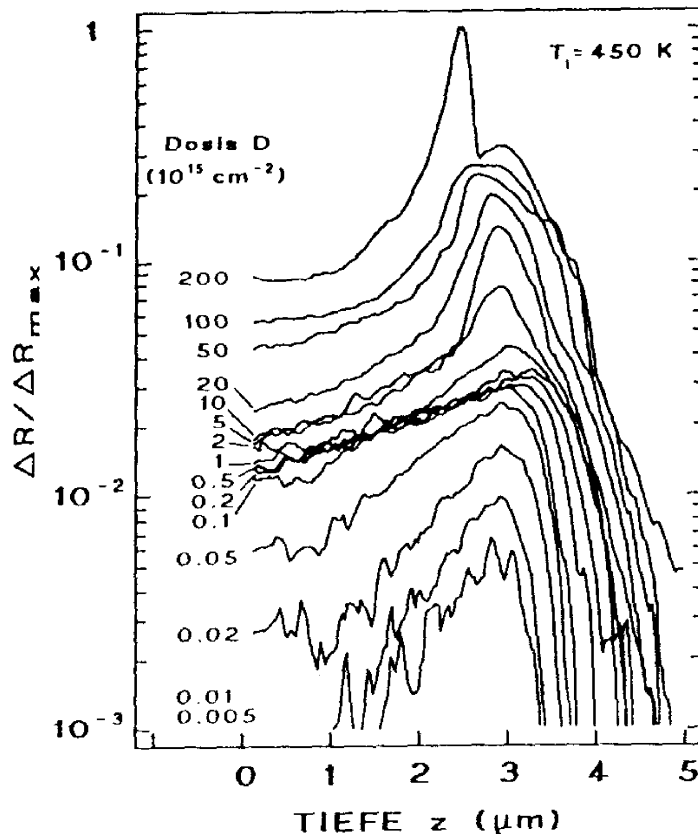


Abb. 6.3
Tiefenprofile der
normierten Reflek-
tivitätsänderung bei
 $\lambda = 650 \text{ nm}$ nach
6 MeV Ni-Implanta-
tion bei 450 K.

Die für Implantationstemperaturen von 420 und 450 K (Abb. 6.3) gemessenen Tiefenprofile zeigen im Dosisbereich bis etwa $5 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ eine qualitativ ähnliche Entwicklung wie die Schädigungsprofile für 400 K, so daß auf eine separate Beschreibung zunächst verzichtet werden kann. Bei höheren Dosen hat der Fremdioneneinfluß auf das optische Signal wegen der im Vergleich zu 400 K-Implantationen geringeren Schädigung ein stärkeres Gewicht und muß bei der Interpretation der Profile berücksichtigt werden. Die Defektentwicklung für Dosen zwischen 1×10^{16} und $2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ wird daher erst in Kap. 6.2.6 – 6.2.8 unter Hinzunahme von TEM-Analysen und weiterer optischer Untersuchungen bei unterschiedlichen Wellenlängen näher behandelt.

Die Tiefe maximaler Schädigung ist für Bestrahlungstemperaturen oberhalb von 300 K nicht über den gesamten untersuchten Dosisbereich konstant. Für 400 K (Abb. 6.2 b) und Dosen bis zu $2.1 \times 10^{13} \text{ Ni/cm}^2$ sowie oberhalb von $5.4 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ befindet sich das Maximum wie bei den niedrigeren Temperaturen (125–300 K) in einer Tiefe von $3.0 \pm 0.1 \mu\text{m}$.

In dem dazwischen liegenden Dosisintervall verschiebt sich das Maximum zu größeren Tiefen (maximal $3.25 \pm 0.1 \text{ } \mu\text{m}$ bei $1.1 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$) und wieder zurück. Eine Verlagerung des Schädigungsmaximums zu größeren Tiefen innerhalb des Dosisintervalls, in dem die Schädigung im Bereich des Maximums unterproportional zur Dosis ansteigt, und eine bei höheren Dosen stattfindende Zurückverlagerung läßt sich auch für Implantationstemperaturen von 350 und 450 K feststellen, bei der geringeren Temperatur weniger stark ausgeprägt.

Die Verlagerung des Maximums ist mit dem Erreichen von Quasisättigungswerten der Schädigung verbunden (450 K , $1 \times 10^{14} - 1 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$, $z \leq 3.25 \text{ } \mu\text{m}$), wobei diese Werte mit der Tiefe zunehmen (Abb. 6.3). Dies deutet darauf hin, daß die zu dem sättigungsähnlichen Schädigungsverhalten führende Punktdefektrekombination selbst tiefenabhängig ist.

Wegen der untergeordneten Bedeutung der Verschiebung der Schädigungsmaxima in diesem Dosisbereich für das Schädigungsverhalten bei höheren Dosen soll darauf an dieser Stelle nicht näher eingegangen werden.

6.2.2 Dosis- und Temperaturabhängigkeit der Schädigung in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft

Der Verlauf des optisch bestimmten Schädigungsgrades in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft ($3.0 \text{ } \mu\text{m}$) ist als Funktion der Dosis in Abb. 6.4 für Targettemperaturen von 125 bis 450 K dargestellt. Die durchgezogenen Kurven wurden mit Hilfe des in Kap. 2.3.4 beschriebenen Strahlenschädigungsmodells berechnet.

Für Dosen bis zu $2 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ läßt sich die Schädigung mit diesem Modell für alle betrachteten Temperaturen im Rahmen der Meßgenauigkeit exakt durch geeignete Anpassung der Modellparameter beschreiben.

Für 400 K und Dosen oberhalb von $2 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ ist eine modellhafte Beschreibung der Defektentwicklung näherungsweise möglich.

Für Temperaturen von 420 und 450 K ist das Modell bei Dosen oberhalb $2 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ nicht anwendbar. Für 450 K-Implantationen wird gezeigt werden, daß sich hier ausgedehnte Defekte bilden, die im

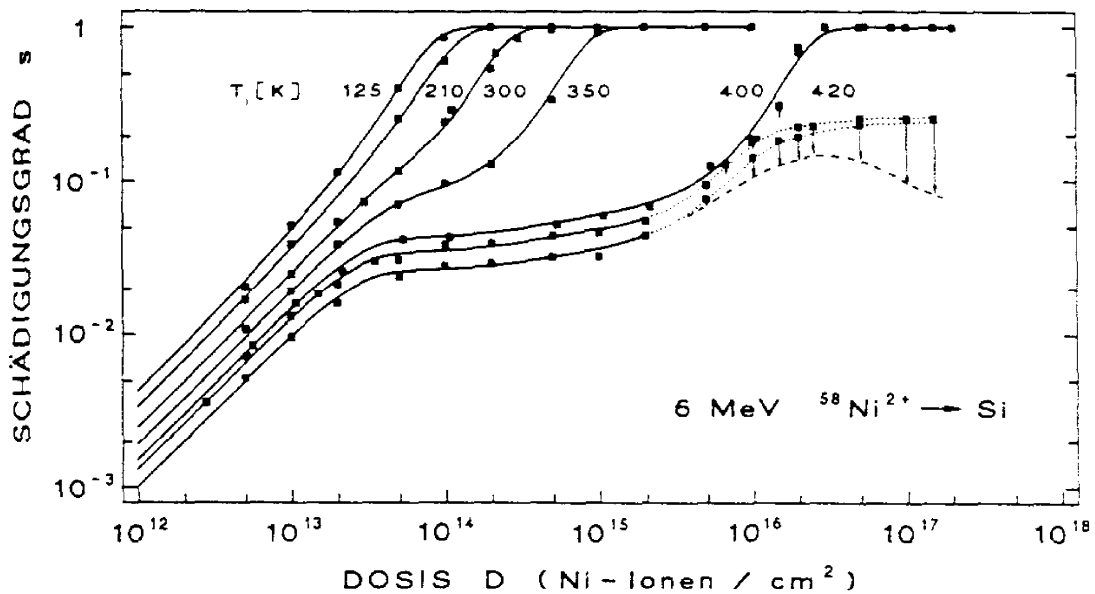


Abb. 6.4

Dosisabhängigkeit des optisch bestimmten Schädigungsgrades in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft nach 6 MeV ^{58}Ni -Implantation in Silizium bei unterschiedlichen Targettemperaturen.

Schädigungsmodell nicht berücksichtigt werden. Die Entwicklung der Schädigung im Bereich der unterbrochen und gepunktet gezeichneten Kurven wird daher gesondert in Kap. 6.2.6 behandelt.

Die Anwendbarkeit des Strahlenschädigungsmodells zur Beschreibung der Schädigung nach 6 MeV Nickelimplantation über einen weiten Temperatur- und Dosisbereich zeigt, daß die dem Modell zugrunde liegenden Defekterzeugungs- und Wechselwirkungsmechanismen auch zur Deutung der experimentell beobachteten Schädigungsentwicklung nach 6 MeV Nickelimplantation bei kleinen und mittleren Dosen herangezogen werden können.

Der für alle Implantationstemperaturen im Bereich kleiner Dosen ($\leq 1 \times 10^{13} \text{ Ni/cm}^2$) beobachtete dosisproportionale Anstieg der Schädigung ist darauf zurückzuführen, daß sich Stoßkaskaden in noch ungeschädigt kristallinem Gebiet ausbreiten und somit jedes Ion, unbeeinflusst vom Schädigungszustand der Siliziummatrix, die gleiche Defektkonzentration hinterläßt. Abweichungen von einem linearen Verhalten beruhen entsprechend dem Modell auf der Wechselwirkung von Defekten, die entlang

verschiedener Ionenspuren erzeugt wurden. Bei hohen Targettemperaturen überwiegt die Rekombination von Punktdefekten gegenüber der Defektstabilisierung durch Bildung von Punktdefektclustern, was zu dem bei Temperaturen von 300 bis 450 K zu beobachtenden unterproportionalen Anstieg des Schädigungsgrades mit der Dosis führt. Der für alle Temperaturen bis einschließlich 400 K vor Erreichen der amorphen Sättigung festzustellende, überproportional zur Dosis erfolgende Anstieg der Schädigung wird durch das Verclustern von Punktdefekten sowie das stimulierte Wachstum amorpher Keime bewirkt.

Zusätzliche Erläuterungen dieser Mechanismen und ihres Einflusses auf die Entwicklung der Schädigung werden noch einmal im Zusammenhang mit der Darstellung des Temperaturverlaufs der Modellparameter, die diese Mechanismen beschreiben, gegeben (Kap. 6.2.4). Da die Modellparameter dort mit denen für die 2 MeV Si-Eigenimplantation verglichen werden, soll zuvor untersucht werden, wie sich die gegenüber 2 MeV Si-Eigenbeschuß geänderte Projektilsorte und Primärenergie quantitativ auf die bei kleinen Dosen erzeugte Schädigung auswirkt.

6.2.3 Defektausbeute im Bereich dosisproportionaler Schädigung

Der für jede Ionensorte bei hinreichend kleinen Dosen zu erwartende Bereich dosisproportionaler Schädigung eignet sich besonders zur Untersuchung der Defektproduktion eines Ions, da hier – wie bereits erläutert – die resultierende Schädigung nicht von Wechselwirkungsprozessen der Defekte aus verschiedenen Stoßkaskaden beeinflusst ist.

Abb. 6.5 zeigt die Temperaturabhängigkeit der Defektausbeute s/D für 6 MeV ^{58}Ni -Ionenbeschuß und zum Vergleich für die 2 MeV ^{28}Si -Eigenimplantation.

Die Abnahme der Defektausbeute s/D mit steigender Targettemperatur läßt sich im untersuchten Temperaturintervall durch den von Heidemann und Kappert /65/ vorgeschlagenen Ausdruck

$$s/D = A - B \exp(-E_a/k_B T) \quad (6.1)$$

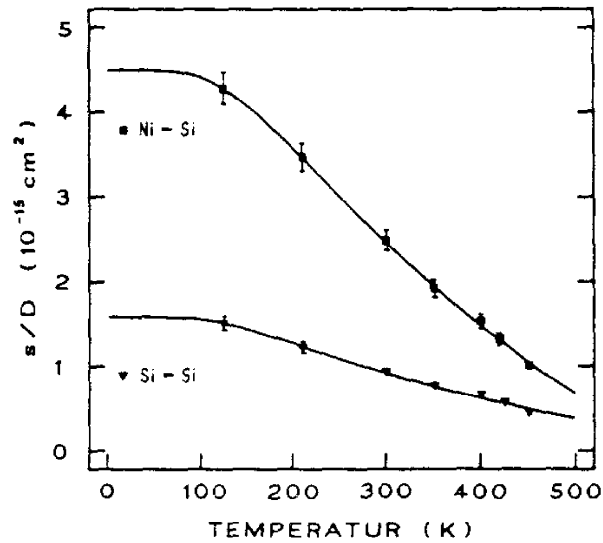


Abb. 6.5

Defektausbeute s/D im Bereich dosisproportionaler Schädigung als Funktion der Targettemperatur für die 6 MeV ^{58}Ni - bzw. 2 MeV ^{28}Si -Implantation in Silizium (Si-Daten aus [72]).

und die in Tab. 6.1 zusammengefaßten Parameter im Rahmen der Meßgenauigkeit exakt beschreiben (durchgezogene Linien in Abb. 6.5). Gl. 6.1 beruht auf der Annahme, daß ein Teil der primär erzeugten Schäden innerhalb der Stoßkaskade thermisch aktiviert ausheilen kann. Da im betrachteten Dosisbereich, wie in Kap. 6.2.4 gezeigt wird, Gitterschäden je nach Targettemperatur zu unterschiedlichen Anteilen in Form von Punktdefekten und amorphen Keimen vorliegen können, repräsentiert der ermittelte Wert von $E_a \approx 40$ meV eine mittlere Anregungsenergie für das Ausheilen verschiedener Defektarten.

Tab. 6.1

Parameter zur Anpassung von Gl. 6.1 an die in Abb. 6.5 dargestellten Defektausbeuten.

	6 MeV ^{58}Ni	2 MeV ^{28}Si
A [10^{-15} cm^2]	4.50	1.57
B [10^{-15} cm^2]	9.87	2.96
E_a [meV]	41 ± 1	39 ± 1

Die Erzeugung von Strahlenschäden wird im vorliegenden Dosisbereich vor allem durch die in nuklearen Stößen deponierte Energie bestimmt. Abb. 6.5 zeigt, daß die Defektausbeute von 6 MeV ^{58}Ni -Ionen bei allen Targettemperaturen höher ist als die von 2 MeV ^{28}Si -Ionen, dabei nimmt das Verhältnis der Ausbeuten von 2.9 bei kleinen Temperaturen (125 K) auf 2.3 bei höheren Implantationstemperaturen (450 K) ab. Es entspricht in etwa dem aus TRIM-Simulationen (Abb. 2.3 bzw. /73/) ermittelten Quotienten der nuklearen Energieverluste $S_n^{\text{max}} = [dE_n/dx]^{\text{max}}$ im Maximum der Bremskraftprofile von Ni- und Si-Ionen:

$$\frac{S_n^{\text{max.Ni}}}{S_n^{\text{max.Si}}} = \frac{58 \text{ eV/\AA}}{25 \text{ eV/\AA}} = 2.3 \quad . \quad (6.2)$$

TRIM-Simulationen der Abbremsung für Si-Ionen im Energieintervall zwischen 2 und 20 MeV ergeben bei zunehmender Primärenergie eine Verringerung des nuklearen Bremskraftmaximums um nur etwa 10 % /80/. Darum ist die höhere nukleare Bremskraft $S_n^{\text{max.Ni}}$ der Ni-Ionen und somit auch deren höhere Defektausbeute nicht auf ihre größere Einschußenergie, sondern in erster Linie auf ihre höhere Masse zurückzuführen.

Entsprechende Untersuchungen /83,84/ zur Defektausbeute von 5 MeV ^{197}Au -Ionen in Silizium bei 450 K ergeben eine um den Faktor 15 höhere Schädigung bei einer 11-fach stärkeren nuklearen Bremskraft im Falle der Au-Implantation, verglichen mit dem 2 MeV Si-Ionenbeschuß. Die beobachteten Abweichungen werden in /83,84/ vor dem Hintergrund der unterschiedlichen Stoßkaskadengeometrien von verschiedenen schweren Ionen diskutiert. Schweren Ionen werden große, kompakte Kaskaden, leichten Ionen kleinere, mehr verästelte Kaskaden zugeschrieben /37/.

Da die Frage, ob ein quasi-flüssiges spike-Volumen bei seiner Abkühlung vollständig kristallisieren kann, empfindlich von den Weglängen abhängt, die die Kristallisationsfronten zurückzulegen haben, beeinflußt bei gleicher deponierter Energie und gleichem spike-Volumen sicherlich auch die Form eines spikes die Produktion amorpher Bereiche. Unterschiedliche spike-Formen können allerdings nur dann zu einer Abweichung zwischen dem Verhältnis der nuklearen Bremskräfte und dem Verhältnis der Defektausbeuten beitragen, falls die Produktion amorpher Keime bei der jeweiligen Targettemperatur einen hinreichend großen Anteil an der Gesamtdefekt-

produktion ausmacht. Diese Bedingung ist für die Nickelimplantation, wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird, nur im Bereich niedriger Targettemperaturen erfüllt. Bei den hohen Temperaturen kann der Schädigungsanteil durch Amorphisierung gegenüber dem durch Punktdefekte im betrachteten Dosisbereich vernachlässigt werden. Dagegen ist im Falle der Au-Implantation auch bei 450 K noch mit einem stärkeren Schädigungsanteil durch Amorphisierung zu rechnen, so daß sich ein Einfluß der Kaskadengeometrie auf die Amorphisierung auch bei höheren Temperaturen auf die Defektausbeute auswirken kann.

Die sich anschließende Betrachtung der zur Beschreibung der Schädigungskurven in Abb. 6.4 und Abb. 2.5 verwendeten Modellparameter zeigt, daß die Temperaturabhängigkeit der Produktion amorpher Bereiche, nicht jedoch die der Punktdefektproduktion für die Temperaturabhängigkeit der Defektausbeuteverhältnisse verantwortlich ist.

6.2.4 Temperaturabhängigkeit der Modellparameter für Defektproduktion und Defektwechselwirkung

Die Modellparameter zur Beschreibung der in Abb. 6.4 dargestellten Dosisabhängigkeit der Schädigung mit Hilfe des in Kap. 2.3.4 erörterten Strahlenschädigungsmodells sind in Tab. 6.2 zusammengefaßt.

Der in den Abb. 6.6 ~ 6.8 dargestellte Temperaturverlauf dieser Parameter spiegelt die sich mit der Targettemperatur ändernden Beiträge der im Anwendungsbereich des Modells vorherrschenden Defektproduktions- und -wechselwirkungsprozesse wider. Zum Vergleich sind in Abb. 6.6 ~ 6.8 zusätzlich die Modellparameter zur Beschreibung der in Abb. 2.5 dargestellten Schädigungskurven für die 2 MeV Si-Eigenimplantation aufgetragen.

Tab. 6.2

Angepaßte Modellparameter zur Beschreibung der in Abb. 6.4 dargestellten Dosisabhängigkeit der Schädigung nach 6 MeV ^{58}Ni -Implantation in Silizium mit dem Schädigungsmodell nach Hecking et al. /72/. Die Parameter P_p , R , C , P_a und A_s sind in Einheiten von 10^{-14} cm^2 tabelliert.

$T_i [\text{K}]$	P_p	R	C	s_p^*	P_a	A_s
125	0.195	0.0	0.70	1	0.23	4.5
210	0.185	0.8	0.55	0.5	0.15	3.2
300	0.180	2.1	0.35	0.16	0.065	1.7
350	0.170	2.4	0.30	0.09	0.020	0.5
400	0.150	3.3	0.25	0.054	0.00075	0.017
420	0.130	3.5	0.22	0.047		
450	0.100	3.5	0.18	0.032		

Produktion, Rekombination und Verclustern von Punktdefekten

Der Parameter P_p beschreibt die Erzeugung von Punktdefekten innerhalb einer einzelnen Stoßkaskade. Zusammen mit dem Faktor P_a für die Produktion amorpher Bereiche erhält man den Schädigungsgrad im Bereich dosisproportionaler Schädigung durch

$$s = (P_p + P_a) D. \quad (6.3)$$

Wegen der mit zunehmender Targettemperatur steigenden Wahrscheinlichkeit für das Ausheilen von Punktdefekten beim Abklingen einer Stoßkaskade nimmt die primäre Punktdefektproduktion P_p mit steigender Targettemperatur ab (Abb. 6.6).

Für alle betrachteten Temperaturen ist die primäre Produktion von Punktdefekten im Falle der Ni-Implantation größer als für die Si-Eigenimplantation (Abb. 6.6), das Verhältnis der Produktionsfaktoren P_p für Ni- und Si-Ionen ist temperaturunabhängig und beträgt 2.3 ± 0.15 .

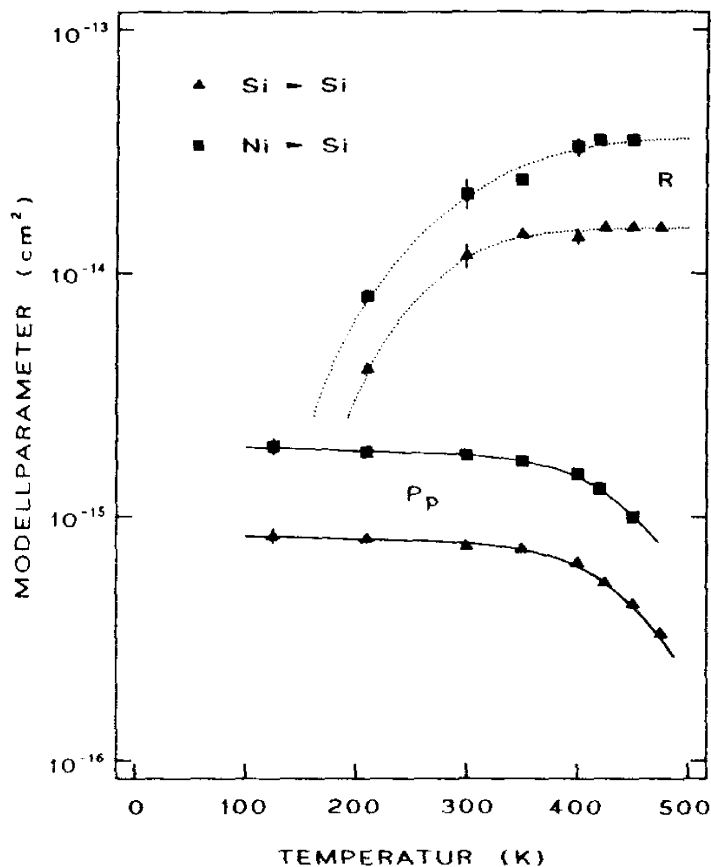


Abb. 6.6

Temperaturabhängigkeit der Modellparameter für die Produktion und Rekombination von Punktdefekten (Si-Daten aus [72]).

Dies entspricht dem Verhältnis der nuklearen Bremskräfte im Profilmaximum gemäß den für diese Ionen durchgeführten TRIM-Simulationen (Gl. 6.2), in Einklang mit der Vorstellung einer Punktdefektproduktion proportional zu der in nuklearen Stößen deponierten Energie. Die Temperaturunabhängigkeit des Verhältnisses der Produktionsfaktoren $p_P^{\text{Ni}}/p_P^{\text{Si}}$ deutet darauf hin, daß die Wahrscheinlichkeit zur Punktdefektrekombination als thermisch aktivierter Prozeß für jeden erzeugten Punktdefekt gleich ist und allein von der Implantationstemperatur, nicht jedoch von der Stoßkaskadengröße oder -form abhängt. Demzufolge sollte bei beiden Ionensorten ein von der Targettemperatur bestimmter relativer Anteil der erzeugten Punktdefekte rekombinieren, so daß auch nach dem Abklingen einer Stoßkaskade das Verhältnis an verbleibenden Punktdefekten für beide Ionensorten dem Verhältnis der zunächst erzeugten Punktdefekte und somit dem Verhältnis ihrer nuklearen Bremskräfte entspricht.

Die Rekombination von Punktdefekten aus *verschiedenen Stoßkaskaden* führt zu dem bei $T_i \geq 300$ K und Dosen von etwa 2×10^{13} Ni/cm² zu beobachtenden Übergang der Schädigungskurven (Abb. 6.4) von einem dosisproportionalen zu einem unterproportionalen Verlauf und wird durch den Parameter R beschrieben. Rekombinationsprozesse zwischen Punktdefekten aus unterschiedlichen Kaskaden treten erst dann merklich in Erscheinung, wenn zum einen die einfallenden Ionen mit hoher Wahrscheinlichkeit auf bereits durch Punktdefekte geschädigte Gebiete treffen und zum anderen die Targettemperatur eine hinreichend hohe Punktdefektbeweglichkeit ermöglicht. Wegen der Zunahme des Rekombinationsvolumens mit steigender Targettemperatur nimmt der Parameter R zu (Abb. 6.6), bei Temperaturen unterhalb 300 K ist die Rekombination vernachlässigbar. Die im Falle der Nickelimplantation für alle Bestrahlungstemperaturen im Vergleich zur Siliziumimplantation höhere Rekombination ist wahrscheinlich auf das von vornherein größere Kaskadenvolumen bei Ni-Ionenbeschuß zurückzuführen.

Die Stabilisierung von Punktdefekten aus unterschiedlichen Stoßkaskaden zu Punktdefektclustern trägt zu dem stärkeren Schädigungsanstieg bei, der bei Temperaturen bis 300 K und Dosen oberhalb 2×10^{13} Ni/cm² nach Durchlaufen des Bereiches dosisproportionalen Schädigungsverhaltens erfolgt (Abb. 6.4). Bei höheren Temperaturen führt die Bildung stabiler Punktdefektcluster zu dem schwachen Anstieg des Schädigungsgrades in dem für Temperaturen oberhalb 300 K ausgeprägten Bereich dosisunterproportionaler Schädigung. Ebenso wie die Punktdefektrekombination kann dieser Defektwechselwirkungsmechanismus erst wirksam werden, wenn sich die Stoßkaskaden in vorgeschädigtem Material ausbreiten.

Das Verclustern wird durch den Parameter C für die Stärke des Clusterbeitrages sowie den Sättigungsparameter s_p^* für den maximal erreichbaren Schädigungsanteil durch einfache oder verclusterte Punktdefekte beschrieben. Die in Abb. 6.7 dargestellte Abnahme der Modellparameter C und s_p^* läßt das mit zunehmender Targettemperatur abnehmende Gewicht der Punktdefektclusterbildung für die Defektproduktion erkennen. Dies kommt bei den in Abb. 6.4 gezeigten Schädigungskurven beispielsweise in der mit zunehmender Temperatur geringer werdenden Steigung im Bereich der "Plateaus" zum Ausdruck. Die für die 6 MeV Ni-Implantation ermittelten Modellparameter C und s_p^* stimmen im untersuchten Temperatur-

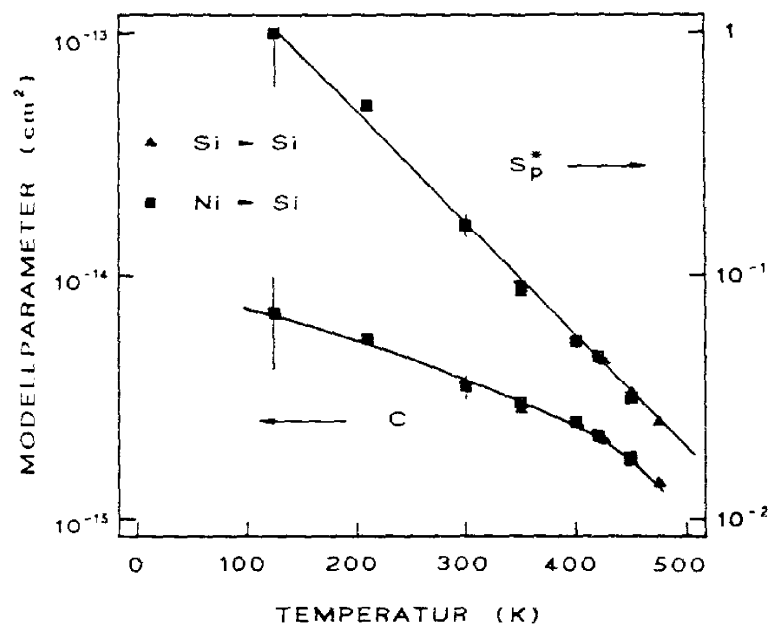


Abb. 6.7

Temperaturabhängigkeit der Modellparameter für das Verclustern von Punktdefekten (Si-Daten aus [72]).

intervall mit denen für die Si-Eigenimplantation überein (Abb. 6.7). Dies gibt Grund zu der Annahme, daß die Bildung von Punktdefektclustern bei diesen Temperaturen in erster Linie vom Targetmaterial und weniger von der Projekttilsorte bestimmt wird.

Produktion und stimuliertes Wachstum amorpher Bereiche

Die Parameter P_a und A_s für die Produktion bzw. das stimulierte Wachstum amorpher Schädigungsanteile sind in Abb. 6.8 als Funktion der Targettemperatur dargestellt. Die Produktion amorpher Volumenanteile P_a trägt demnach bei Temperaturen bis zu 350 K schon im Bereich kleiner Dosen gemäß Gl. 6.3 wesentlich zur Schädigung bei, während bei höheren Targettemperaturen und kleinen Dosen dieser Schädigungsanteil gegenüber dem durch Punktdefekte vernachlässigbar ist.

Die Verringerung der Produktion P_a amorpher Volumenanteile mit steigender Targettemperatur kann im Rahmen des energy-spike-Konzepts (Kap. 2.3.2) auf den langsameren Verlauf der Abkühlung eines hochangeregten spike-

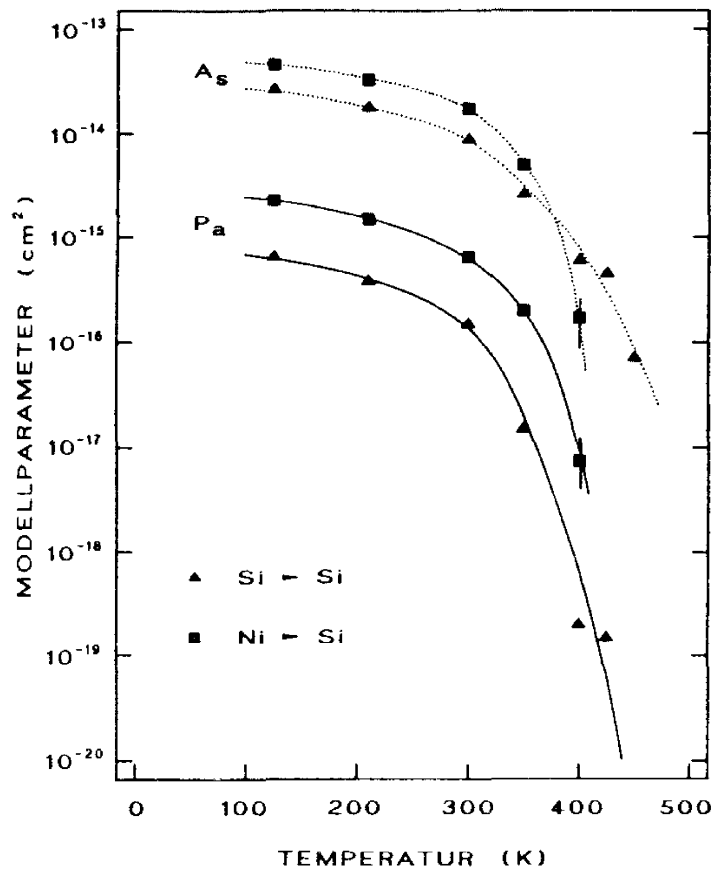


Abb. 6.8

Temperaturabhängigkeit der Modellparameter für die Produktion und das stimulierte Wachstum amorpher Volumenanteile (Si-Daten aus [72]).

Volumens bei höheren Umgebungstemperaturen zurückgeführt werden. Damit nimmt die Wahrscheinlichkeit dafür zu, daß die von der Berandung des spike-Volumens ausgehenden Kristallisationsfronten das spike-Zentrum erreichen, bevor dort die Kristallisationstemperatur unterschritten wird und somit vollständige Kristallisation erfolgt.

Aufgrund ihrer höheren Masse erzeugen Ni-Ionen bei allen untersuchten Targettemperaturen mehr amorphes Material als Si-Ionen (Abb. 6.8). Das Verhältnis der Produktionsfaktoren P_a^{Ni} / P_a^{Si} beträgt 3.6 bei $T_i = 125$ K und nimmt mit steigender Targettemperatur monoton zu. Es ist somit für alle Targettemperaturen größer als das Verhältnis der nuklearen Bremskräfte von Ni- und Si-Ionen in den Profilmaxima. Zu diesem Unterschied tragen möglicherweise – wie in Kap. 6.2.3 erläutert – unterschiedliche spike-Geometrien aufgrund der verschiedenen Projektilmassen bei, indem

sie eine vollständige Kristallisation der aufgeschmolzenen Bereiche mehr oder minder begünstigen. Für eine nähere Klärung sind Simulationsrechnungen vollständiger Stoßkaskaden wünschenswert.

Das stimulierte Wachstum amorpher Bereiche, beschrieben durch den Parameter A_s (Abb. 6.8), führt zu dem bei allen Temperaturen bis 400 K zu beobachtenden überproportional zur Dosis erfolgenden Anstieg der Schädigung (Abb. 6.4), bevor Schädigungssättigung durch vollständige Amorphisierung erreicht wird. Unter der Annahme, daß amorphe Bereiche in der Berandung eines spike-Volumens die epitaktische Kristallisation von diesen Stellen aus unterdrücken, erfolgt die Zunahme des amorphen Schädigungsanteils proportional (Faktor A_s) zu den bereits vorhandenen amorphen Volumenanteilen.

Die beobachtete Abnahme von A_s mit zunehmender Targettemperatur (Abb. 6.8) bedeutet, daß der Einfluß amorpher Bereiche in der Berandung eines spike-Volumens schwächer wird, wenn bei höheren Temperaturen längere Zeiten für die Kristallisation der spike-Volumina zur Verfügung stehen.

Auffällig ist, daß der für die Nickelimplantation bestimmte Stimulationsparameter zwar bei kleinen Targettemperaturen größer ist als der für die Si-Eigenimplantation, dann jedoch zu höheren Temperaturen erheblich steiler abfällt und für $T_i = 400$ K sogar kleiner ist als der entsprechende Wert für die Si-Implantation. Hierbei ist zu berücksichtigen, daß sich mit zunehmender Targettemperatur der Dosisbereich überproportional zur Dosis anwachsender Schädigung, durch den A_s vor allem festgelegt wird, zu höheren Dosen verschiebt (Abb. 6.4), so daß sich die Stoßkaskaden in einem zunehmend mit Nickel angereicherten Target ausbreiten. Das Verhalten von A_s sowie der Einfluß von Nickel auf die Amorphisierung werden in Kap. 6.2.5 und 6.2.7 unter Berücksichtigung weiterer Untersuchungsergebnisse näher diskutiert.

6.2.5 Temperaturabhängigkeit der Amorphisierungsdosis

Die kritische Dosis D^* , die notwendig ist zur Erzeugung einer amorphen Schicht in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft, ist in Abb. 6.9 für die 6 MeV ^{58}Ni -Implantation als Funktion der Implantationstemperatur dargestellt. Zum Vergleich sind zusätzlich experimentell ermittelte Amorphisierungsdosen für die Implantation von 2 MeV ^{28}Si -Ionen und 5 MeV ^{197}Au -Ionen angegeben.

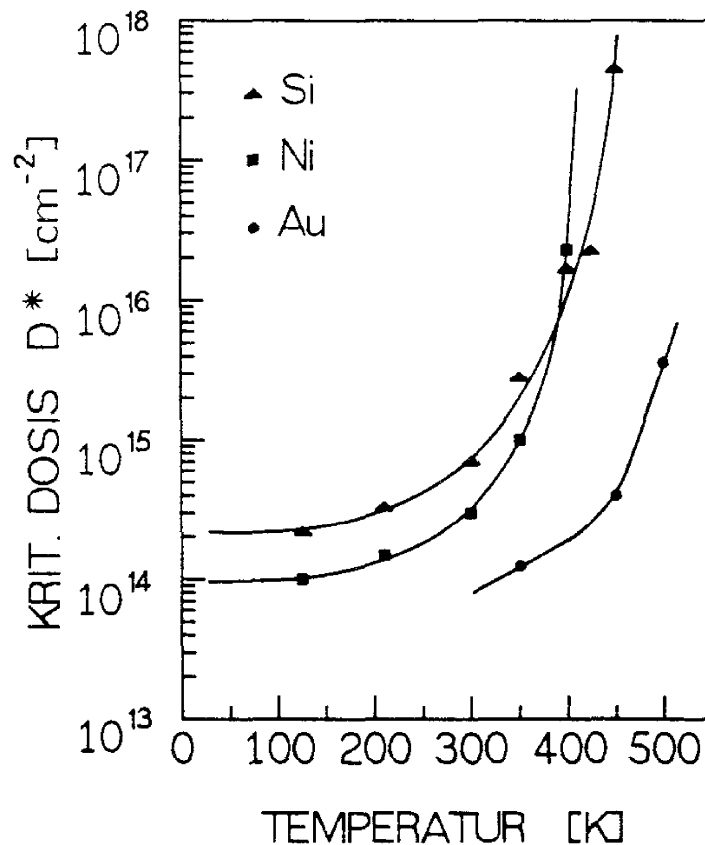


Abb. 6.9

Temperaturabhängigkeit der Amorphisierungsdosis von Silizium bei der Implantation von 6 MeV ^{58}Ni -, 2 MeV ^{28}Si - und 5 MeV ^{197}Au -Ionen. (Si-Daten aus /72/, Au-Daten aus /84/.)

Für die 5 MeV ^{197}Au -Implantation in Silizium liegen zuverlässige Amorphisierungsdosen nur für Temperaturen ab 350 K vor, so daß für tiefe Temperaturen ein Vergleich nur zwischen den Ergebnissen für Ni- und Si-Ionenbeschuß erfolgen kann. Aus den durch Extrapolation bestimmten kritischen Dosen $D_{T \rightarrow 0}^*$ und den aus TRIM-Simulationen gewonnenen

Kernbremskräften S_n^{\max} im Maximum der Tiefenprofile (25 eV/Å für 2 MeV $^{28}\text{Si} \rightarrow \text{Si}$ /73/ bzw. 58 eV/Å für 6 MeV $^{58}\text{Ni} \rightarrow \text{Si}$ (s. Abb. 2.3)) erhält man gemäß Gl. 2.4 eine kritische Energiedichte e_c von $(5.5 \pm 0.5) \times 10^{23}$ bzw. $(5.3 \pm 0.5) \times 10^{23}$ eV/cm³, die zum Erreichen der Amorphisierung durch Ni- bzw. Si-Ionenbeschuß deponiert werden muß. Diese Werte stimmen gut mit den in der Literatur /55-57,63/ angegebenen Energiedichten von $\sim 5 - 6 \times 10^{23}$ eV/cm³ für Tieftemperatur-implantationen im keV-Bereich überein.

Mit zunehmender Targettemperatur nimmt die Produktion sowie das stimulierte Wachstum amorpher Bereiche ab, woraus sich der experimentell zu beobachtende Anstieg der kritischen Dosen mit zunehmender Targettemperatur ergibt.

Im Bereich kleiner Temperaturen (≤ 350 K) liegen die Amorphisierungsdosen für ^{58}Ni -Ionen zwischen denen der ^{197}Au - und denen der ^{28}Si -Ionen, wie aufgrund der unterschiedlichen Massen zu erwarten ist. Mit zunehmender Implantationstemperatur steigt die zur Amorphisierung durch Ni-Ionenbeschuß erforderliche Dosis D^* jedoch unerwartet stark an. Bei 400 K liegt die kritische Dosis für die Ni-Implantation sogar höher als die für die Si-Eigenbestrahlung. Bei einer Temperatur von 450 K läßt sich, wie nachfolgend gezeigt wird, in der Tiefe des nuklearen Bremskraftmaximums bis zu Dosen von 1.3×10^{18} Ni/cm² keine Amorphisierung feststellen und es bildet sich eine schwer zu amorphisierende Ni-Si-Verbindung.

Da gemäß der oben diskutierten Modellrechnungen (Kap. 6.2.4) das Verhältnis der Produktionsfaktoren für amorphe Bereiche $P_a^{\text{Ni}} / P_a^{\text{Si}}$ mit steigender Targettemperatur zunimmt, ist der starke Anstieg der Amorphisierungsdosis im Falle der Nickelimplantation nicht auf eine (gegenüber der Siliziumimplantation) verringerte Produktion, sondern vor allem auf die unerwartet stark reduzierte Stimulation des Wachstums amorpher Volumenanteile im Bereich hoher Implantationstemperaturen bzw. Dosen zurückzuführen.

Eine Verringerung der Wachstumsstimulation amorpher Volumenanteile ist gleichbedeutend mit einer Erhöhung der Kristallisation der quasi-flüssigen spike-Volumina. Diese tritt offenbar dann auf, wenn zum Erzeugen starker Schädigung aufgrund hoher Targettemperaturen hohe Dosen erforderlich sind und sich die Stoßkaskaden in einer Siliziummatrix ausbreiten, die bereits merkliche Ni-Konzentrationen enthält.

Gemäß der in Abb. 2.3 dargestellten TRIM-Simulation läßt sich – unter Vernachlässigung möglicher Profilveränderungen bei hohen Implantations-temperaturen (Kap. 6.2.8) – für eine Dosis von 1×10^{16} Ni/cm² eine Nickelkonzentration von 0.3 at.% im Maximum des Ionenprofils und ein etwa halb so hoher Wert für die Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft abschätzen.

Es ist bekannt, daß Dotierstoffkonzentrationen in dieser Größenordnung (0.2 – 1 at.%) zu Veränderungen der Kristallisationsgeschwindigkeit amorpher Siliziumschichten um zwei bis drei Größenordnungen führen können /195,196/. Die Gegenwart von Fremdatomen kann dabei je nach Atomsorte sowohl zu erhöhten (B, P, As, Sb /195,197/) als auch zu verringerten (C, N, O, Ne, Ar, Kr, Pb /196,198,199/) Kristallisationsraten führen, wobei der Fremdatomgehalt und die Kristallisationsgeschwindigkeit nicht in einem monotonen Zusammenhang stehen müssen /195/. Untersuchungen von Della Mea et al. /200/ deuten darauf hin, daß Bor in Konzentrationen von 0.2 at.% zu einer Erhöhung der Raumtemperatur-Amorphisierungsdosis von Silizium um mehr als einen Faktor 7 führt.

Entsprechende Untersuchungen des Einflusses einer Nickeldotierung auf die Amorphisierungsdosis oder auf die Kristallisationsgeschwindigkeit amorpher Siliziumschichten sind nicht bekannt. Weitere Hinweise auf den Einfluß des implantierten Nickels auf die Entwicklung der Strahlenschädigung liefern aber die in Abschnitt 6.2.7 dargestellten Untersuchungen an 450 K-Hochdosisimplantaten.

6.2.6 Bildung ausgedehnter Defekte bei 450 K

Der in Kap. 6.1 erläuterte Einfluß der implantierten Nickelatome auf das optische Signal kommt wegen der geringeren Defektausbeute insbesondere bei höheren Implantationstemperaturen zum Tragen und muß bei der Interpretation normierter Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung, wie sie in Abb. 6.3 dargestellt sind, vor allem bei Dosen oberhalb etwa 2×10^{15} Ni/cm² berücksichtigt werden.

Mit Hilfe des in Kap. 6.1 beschriebenen Verfahrens zur Abschätzung des nickelbedingten Beitrages zur Reflektivitätsänderung kann aus den in Abb. 6.3 dargestellten Profilen näherungsweise der Verlauf der Schädigung in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft gewonnen werden. Durch Anwendung dieses Verfahrens ergibt sich in Abb. 6.4 aus den unterbrochen gezeichneten Verbindungslinien der unkorrigierten $\Delta R/\Delta R_{\max}$ -Meßwerte für 420 und 450 K die gepunktet dargestellte Schädigungskurve, die im Rahmen der groben Abschätzung den Schädigungsverlauf für beide Temperaturen repräsentiert.

Demnach erreicht für 420 und 450 K die Schädigung bei Dosen zwischen 2 und 5×10^{16} Ni/cm² ein Maximum und fällt bei weiterer Dosissteigerung ab.

Im Falle der 2 MeV Si-Eigenimplantation wurde für Targettemperaturen von 450 und 475 K in einem vergleichbaren Dosisbereich eine ähnliche Entwicklung des optisch bestimmten Schädigungsgrades mit der Dosis beobachtet und der Umwandlung von Punktdefektclustern in Stapelfehler und deren anschließende Umformung zu Versetzungsringen und ungeordneten Versetzungsnetzwerken zugeschrieben (Kap. 2.3). Es ist daher zu überprüfen, ob auch im Falle der 6 MeV Ni-Implantation unter diesen Implantationsbedingungen Stapelfehler und Versetzungen gebildet werden. Dazu wurden transmissionselektronenmikroskopische Untersuchungen an einigen der bei 450 K bestrahlten Proben durchgeführt.

Abb. 6.10 gibt einen Überblick über die Tiefenverteilung von Defekten bei einer Dosis von 1×10^{16} Ni/cm², aufgenommen an einer in cross-section-Technik präparierten Probe. Strahlenschäden lassen sich von der Oberfläche an bis in eine Tiefe von etwa 3,8 µm nachweisen. Es handelt sich hauptsächlich um Punktdefektcluster, die eine körnige Kontraststruktur (sog. salt and pepper Kontrast) mit Kontrastbereichen von etwa 80 Å Durchmesser hervorrufen (Abb. 6.10 b). Zusätzlich lassen sich, wie aus den optischen Untersuchungen erwartet, insbesondere im Tiefenbereich nahe dem nuklearen Bremskraftmaximum einige flächen- bzw. linienhafte Kristallbaufehler beobachten.

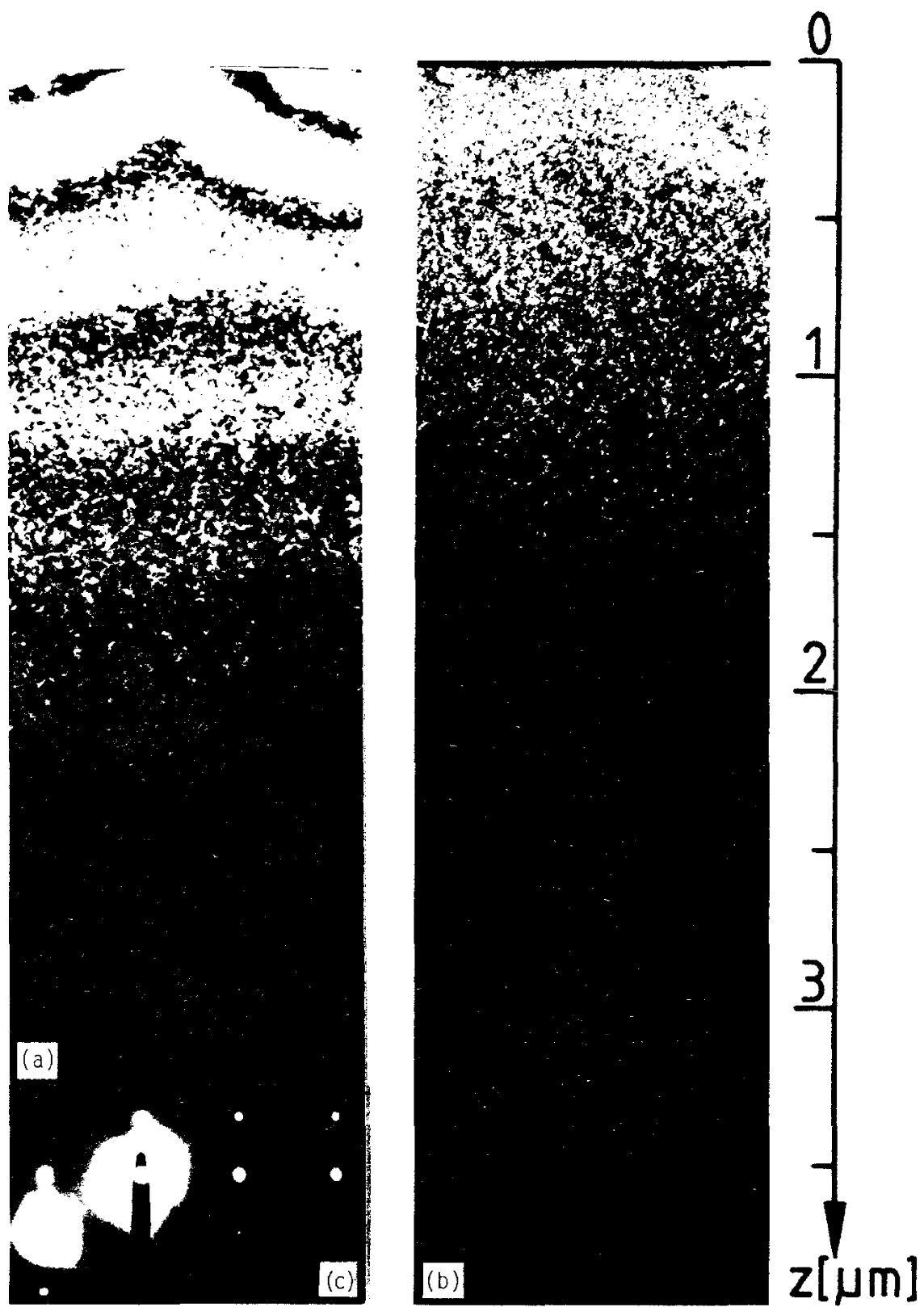


Abb. 6.10

XTEM-Aufnahmen der Schädigung bei einer Dosis von $1 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). Oberflächennormale und Probenorientierung $\parallel [\bar{2}11]$.
 (a) Hellfeld; (b) $(0\bar{2}2)$ -Dunkelfeld; (c) $[\bar{2}11]$ -Beugungsbild.

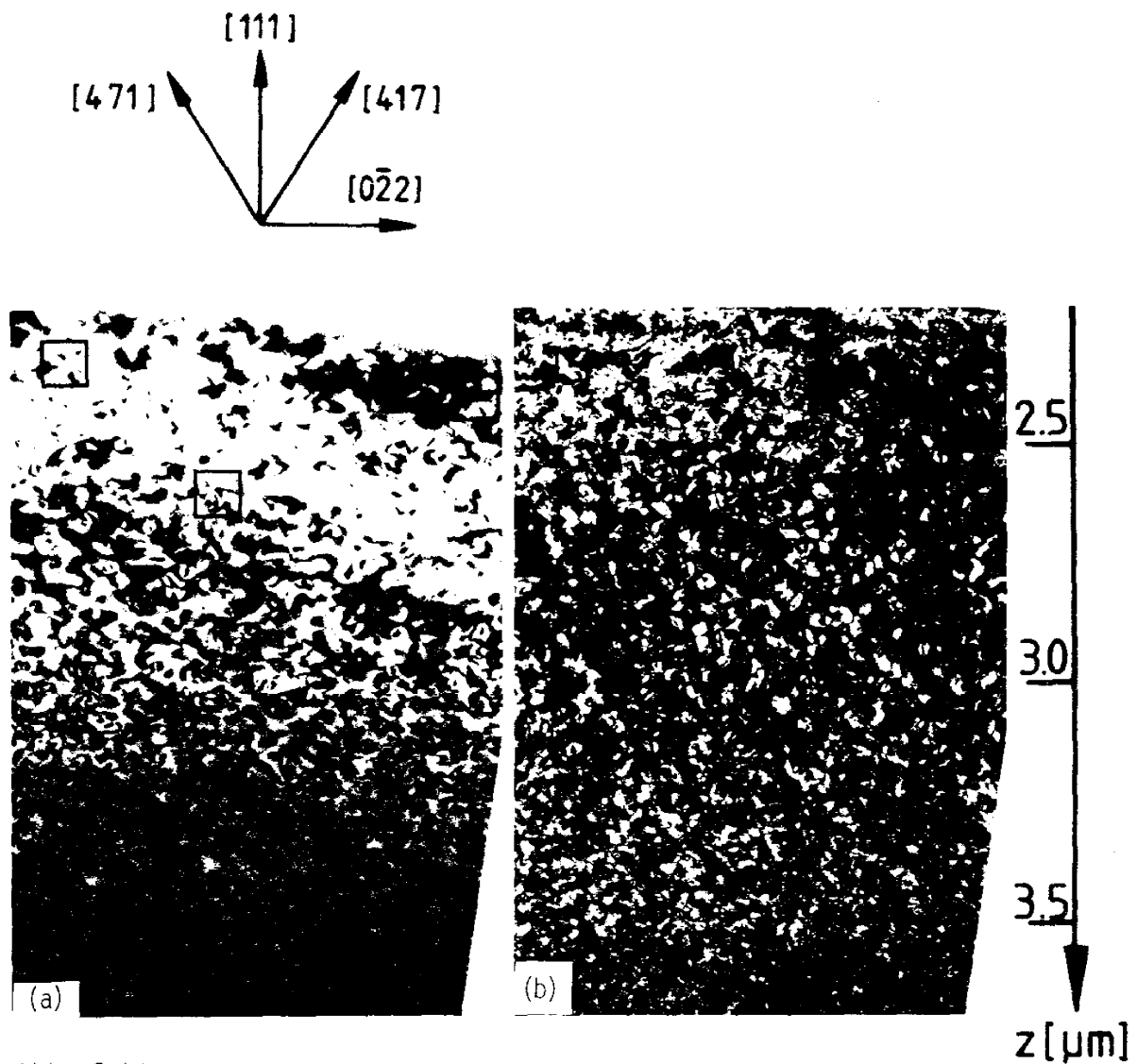


Abb. 6.11

Hellfeld- (a) / Dunkelfeld- (b) Aufnahmenpaar für einen Tiefenausschnitt der in Abb. 6.10 dargestellten Probe unter entsprechenden Abbildungsbedingungen. Verschiedene Defekte sind in beiden Aufnahmen markiert.

Diese Tiefenzone sowie der hintere Strahlenschädenausläufer sind in Abb. 6.11 detaillierter dargestellt. In einer Tiefe von etwa $2.6 \pm 0.2 \mu\text{m}$ beobachtet man einen Übergang zwischen zwei Bereichen, von denen der obere charakterisiert ist durch das Vorliegen von Stapelfehlern mit typischen Durchmessern von etwa 250 \AA (maximal 400 \AA), während im tiefergelegenen Bereich an Stelle von Stapelfehlern zahlreiche Versetzungsringe mit Durchmessern bis zu 400 \AA auftreten. Die Stapelfehler verursachen scharfe Linienkontraste, von denen ein Großteil in $[471]$ - oder $[417]$ -Richtungen, d.h. senkrecht zu $[\bar{1}1\bar{3}]$ - bzw. $[\bar{1}\bar{3}1]$ -Richtungen verläuft. Eine detailliertere Stapelfehleranalyse wird weiter unten für eine Dosis von $5 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ gegeben.

Der Bereich hoher Dichte an Versetzungsringen nahe $z = 3.0 \text{ } \mu\text{m}$ ist gekennzeichnet durch eine vergleichsweise geringe Dichte an Punktdefektclustern. Dies gibt Grund zu der Annahme, daß sich ähnlich wie bei der 2 MeV Si-Eigenimplantation bei hohen Targettemperaturen eine *Umwandlung von ungeordneten Schäden in Form von Punktdefektclustern zu den geordneten Schäden in Form von Versetzungen* vollzieht. Mit zunehmender Tiefe ($z \geq 3.2 \text{ } \mu\text{m}$) läßt sich ein kontinuierlicher Übergang zu einer Defektstruktur beobachten, die — wie in Abb. 6.11 (b) zu sehen — vor allem durch Punktdefektcluster gekennzeichnet ist. Eine genaue Analyse der hier vorliegenden Defekttypen wird durch die hohe Defektdichte erschwert.

Die sich bei einer Dosis von $1 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ abzeichnende Defektumwandlung ist bei der doppelten Dosis noch stärker ausgeprägt. Abb. 6.12 zeigt ein weiteres Hellfeld/Dunkelfeld-Abbildungspaar der Tiefenverteilung von Defekten für eine Dosis von $2 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$.

Im Bereich nahe der Oberfläche werden wie bei der kleineren Dosis vornehmlich Punktdefektcluster beobachtet, die hier allerdings eine grobkörnigere Kontraststruktur ($\varnothing \sim 100 - 200 \text{ } \text{\AA}$) hervorrufen. Bereits ab einer Tiefe von etwa $1.3 \text{ } \mu\text{m}$ lassen sich einzelne Versetzungsringe erkennen, die Dichte dieser Defekte nimmt deutlich mit der Tiefe zu. Der typische Durchmesser der insbesondere zwischen 1.9 und $3.1 \text{ } \mu\text{m}$ Tiefe auftretenden Versetzungsringe beträgt $\sim 200 \text{ } \text{\AA}$, die größten Versetzungsringe mit Durchmessern bis zu $500 \text{ } \text{\AA}$ liegen nahe $z = 3 \text{ } \mu\text{m}$ vor. Ein kleiner Teil dieser Versetzungsringe ist möglicherweise dekoriert (vgl. Kap. 6.2.8). Der hintere Strahlenschädenausläufer ist vor allem geprägt durch Punktdefektcluster, die bis in Tiefen von etwa $4.0 \text{ } \mu\text{m}$ beobachtet werden können. Die dort vorliegende salt and pepper Struktur unterscheidet sich merklich durch ihre höhere Feinkörnigkeit von der Kontraststruktur nahe der Oberfläche.

Auch bei dieser Dosis lassen sich Stapelfehler beobachten, wie exemplarisch in Abb. 6.13 an Hand der für diesen Defekttyp charakteristischen Hellfeld/Dunkelfeld-Umkehrung des Streifenkontrastes gezeigt wird.

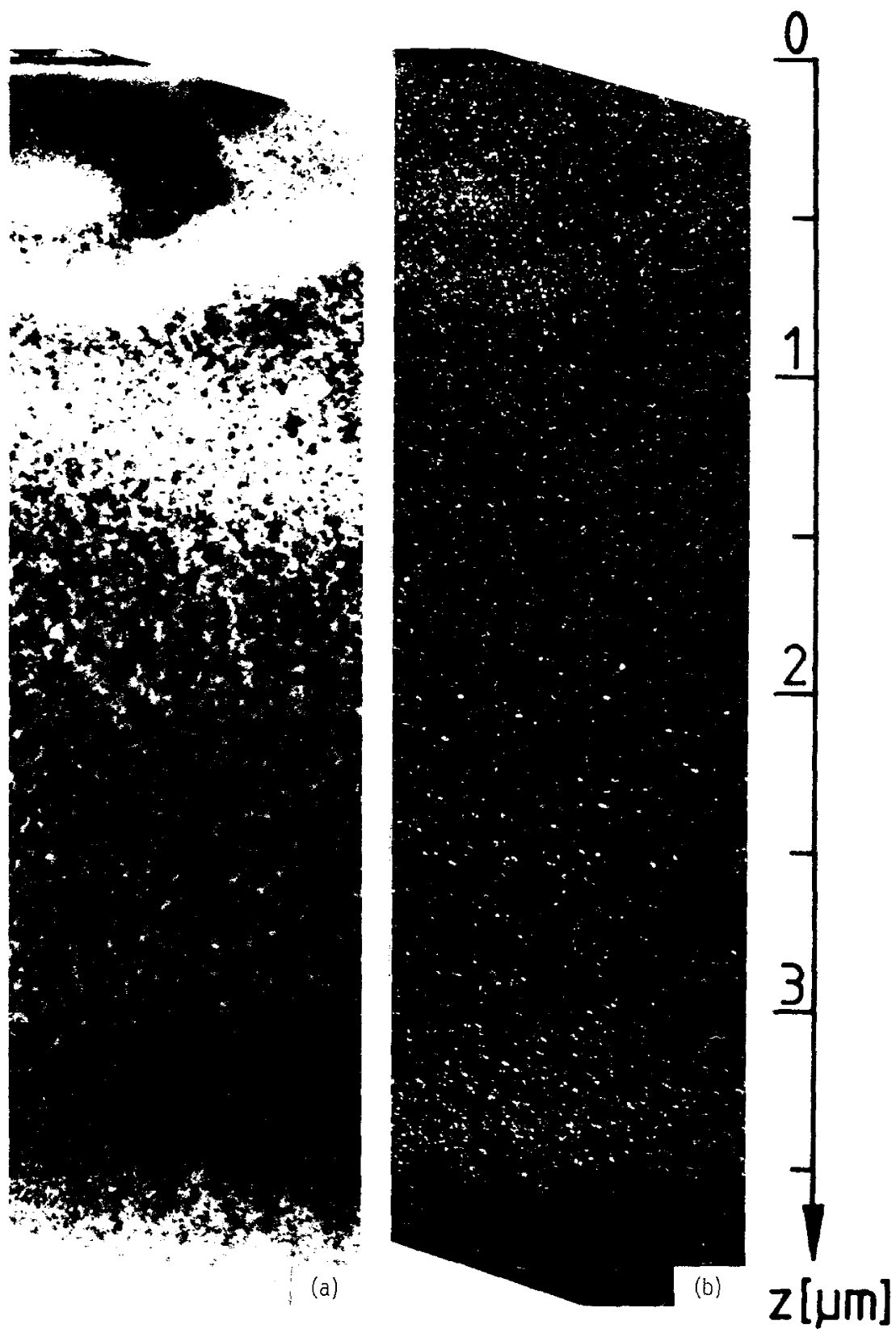


Abb. 6.12

XTEM-Aufnahmen der Schädigung bei einer Dosis von $2 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). Oberflächennormale $\parallel \sim [32\bar{5}]$, Probenorientierung $\parallel [21\bar{2}]$.
 (a) Hellfeld; (b) Schwachstrahldunkelfeld $\vec{g}/3\vec{g}$, $\vec{g} = (202)$.

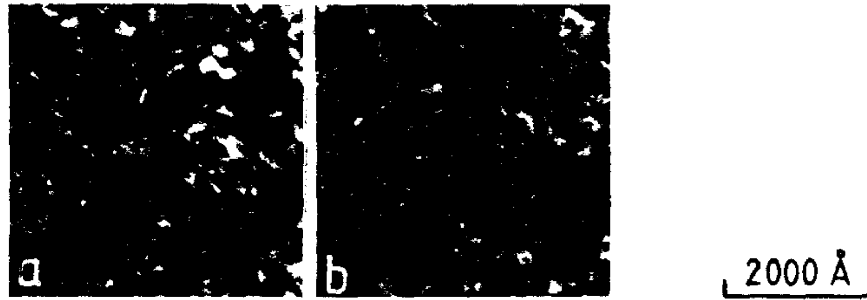
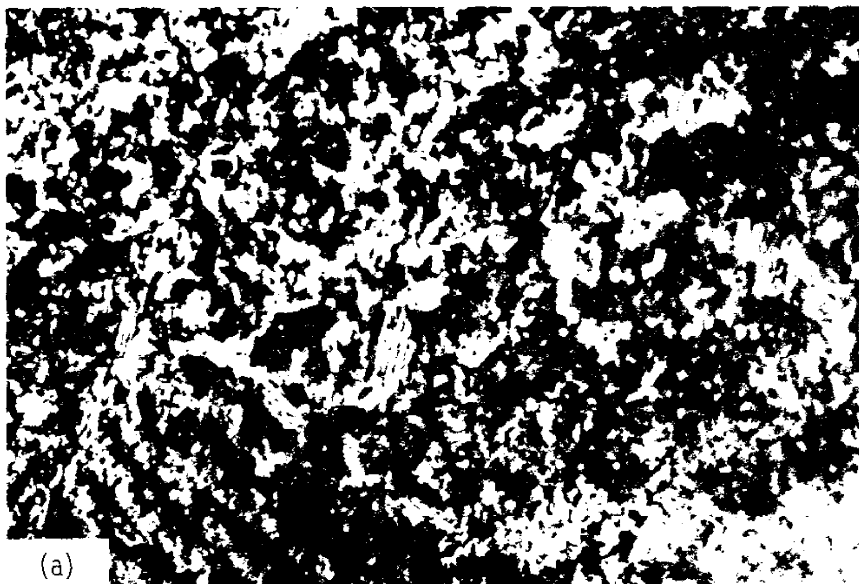
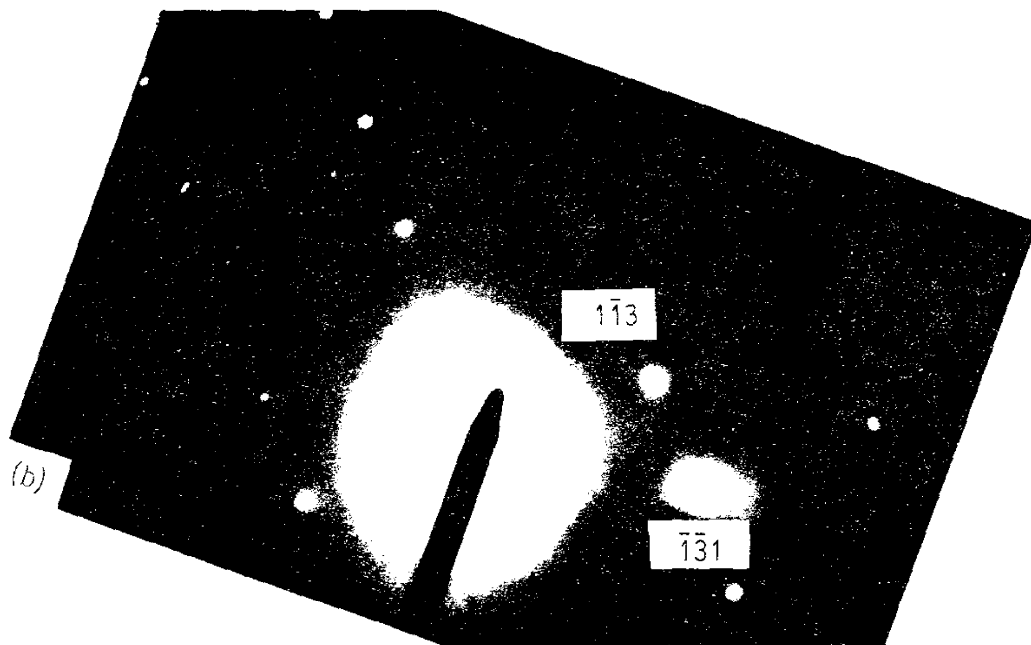


Abb. 6.13

Ausschnitt aus der in Abb. 6.12 dargestellten Defektstruktur. Der Zeiger weist auf einen kleinen Defekt mit gebogenem Streifenkontrast. (a) Hellfeld; (b) Dunkelfeld $\vec{g} = (202)$.

Bei einer Dosis von $5 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ lassen sich im Bereich des hinteren Ausläufers des Strahlenschädenprofils einige größere Stapelfehler beobachten, die sich für eine genauere Untersuchung eignen. Abb. 6.14 (a) zeigt eine $\{111\}$ -Dunkelfeldaufnahme, aufgenommen an einer XTEM-Probe mit einer $[\bar{1}10]$ -Oberflächennormalen. Für die Aufnahme wurde die Probe so orientiert, daß ihre $[\bar{2}11]$ -Richtung parallel zum Elektronenstrahl zeigt. Das unter Berücksichtigung der magnetischen Bildrotation der Mikroskoplinsen ausgerichtete Feinbereichsbeugungsbild ist in Abb. 6.14 (b) wiedergegeben. Unter diesen Abbildungsbedingungen lassen sich Stapelfehler offenbar in zwei unterschiedlichen Defektlagen beobachten, bei der einen (a) verläuft der Streifenkontrast in $[114]$ -Richtung (senkrecht zu $[\bar{1}\bar{3}1]$), bei der anderen (b) in $[110]$ -Richtung (senkrecht zu $[1\bar{1}3]$), der Streifenabstand ist für beide Lagen gleich. Üblicherweise liegen Silizium-Stapelfehler auf $\{111\}$ -Netzebenen, für den Fall der 2 MeV Hochtemperatur-Si-Eigenimplantation zeigen ausführliche Analysen jedoch ausschließlich Stapelfehler auf $\{113\}$ -Ebenen $/70,71^\circ/$. $\{111\}$ -Ebenen scheiden hier als mögliche Stapelfehlerebenen aus, da sie keine Kontraststreifen parallel zu $[114]$ (Defektlage (a)) verursachen können. Nimmt man an, daß die untersuchten Stapelfehler auf kristallographisch äquivalenten Netzebenen liegen, so kommen dafür die $(\bar{3}\bar{1}1)$ -Ebene (Defektlage (a)) bzw. die $(\bar{1}13)$ -Ebene (Defektlage (b)) als Stapelfehler-ebene in Frage. Da diese Netzebenen jeweils gleiche Neigungswinkel bezüglich der Probennormalen und bezüglich der Elektronenstrahlrichtung besitzen, sind für Stapelfehler auf $(\bar{3}\bar{1}1)$ - und $(\bar{1}13)$ -Ebenen unter den vorliegenden Abbildungsbedingungen gleiche Kontraststreifenabstände zu erwarten, in Übereinstimmung mit dem experimentellen Befund.



2000 Å

Abb. 6.14

Stapelfehler im Bereich der hinteren Flanke des Schädigungsprofils bei einer Dosis von $5 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). Oberflächennormale $\parallel [\bar{1}10]$, Orientierung $\parallel [\bar{2}11]$. (a) (111) -Dunkelfeldaufnahme; (b) $[\bar{2}11]$ -Beugungsbild.

Ausgedehnte Defekte werden nach Hochtemperaturionenbeschuß von Silizium auch für den Fall kleinerer Primärenergien und anderer Ionensorten beobachtet (z.B. /83-85,201-204/).

Beispielsweise lassen sich nach 120 keV N-Implantation in (111)-Silizium ($D = 2 \times 10^{17} \text{ N/cm}^2$, $T_i \approx 300^\circ \text{C}$) im Bereich einer amorph/kristallinen Grenzschicht {111}-Versetzungsschleifen von 150 Å Durchmesser sowie "ausgedehnte Defekte" auf {113}-Ebenen mit 30 - 100 Å Länge feststellen /203/. Die ausgedehnten Defekte werden bevorzugt auf einer der zwei in (110)-cross-section Proben hochkant stehenden {113}-Ebenen gefunden, anders als in den hier vorgestellten Untersuchungen, die keine Hinweise auf die Bevorzugung einer bestimmten {113}-Ebene ergeben. Planare Defekte auf {113}-Ebenen werden ebenfalls in /85/ und /201/ beobachtet.

Holland et al. /204/ ermitteln durch RBS- und TEM-Analysen an mit 1.25 MeV Si-Ionen implantierten (100)-Si-Wafern ($D \approx 4 \times 10^{15} \text{ Si/cm}^2$) ein vergrabenes Band von Versetzungsschleifen sowie kleine, nur bei der RBS-Analyse beobachtbare Defektcluster (vermutlich Doppelleerstellen) nahe der Probenoberfläche. Leider geben die Autoren nicht die verwendete Implantationstemperatur an.

Elliman et al. /202/ untersuchen die Tiefenverteilung von Strahlenschäden nach 1.5 MeV Ne-Implantation in (100)-Silizium bei 200 und 350 °C für eine Dosis von $5 \times 10^{16} \text{ Ne/cm}^2$. Für 200 °C finden sie Punktdefektcluster, "mittlere Defektkomplexe" und Versetzungsschleifen ($\emptyset < 200 \text{ Å}$), deren Konzentration von der Oberfläche an bis in die Tiefe der mittleren Ionenreichweite zunimmt. Dagegen erhalten diese Autoren bei 350 °C ausgedehnte Defekte nur innerhalb eines vergrabenen Bandes nahe R_p und schließen daraus, daß die Produktionsrate von Punktdefekten eine wichtige Rolle für die Bildung und das Wachstum stabiler, ausgedehnter Defekte spielt.

TEM-Untersuchungen /83,84/ nach 5 MeV Au-Implantation in (111)-Silizium bei 450 K zeigen, daß bei Dosen unterhalb der Amorphisierungsschwelle keine Schädigungsstadien durchlaufen werden, die durch das Vorliegen merklicher Stapelfehler- oder Versetzungskonzentrationen gekennzeichnet sind. Die hohe Ionenmasse bedingt in diesem Falle allerdings bereits bei einer Dosis von etwa $5 \times 10^{14} \text{ Au/cm}^2$ das Eintreten der Amorphisierung. Für höhere Implantationstemperaturen (550 und 650 K) werden auch im Falle der Goldimplantation bei einer Dosis von $2 \times 10^{17} \text{ Au/cm}^2$ Stapelfehler und Versetzungen beobachtet.

Die hier diskutierten Untersuchungsergebnisse lassen insgesamt den Schluß zu, daß hohe Dosen und Targettemperaturen entscheidende Kriterien für die Erzeugung merklicher Konzentrationen an ausgedehnten Defekten darstellen.

Da ähnliche Defekte beim Tempern strahlengeschädigten Siliziums üblicherweise erst oberhalb 650 °C auftreten /69/, ist davon auszugehen, daß die Umwandlung von Punktdefektclustern in stabile, ausgedehnte Defekte während der Relaxation von Stoßkaskaden ausgelöst wird. Somit wäre jeder Kaskade eine Wahrscheinlichkeit für die Initiierung eines solchen Defektumwandlungsprozesses zuzuordnen. Kann die Bestrahlung bis zu einer genügend hohen Dosis durchgeführt werden, ohne daß Amorphisierung einsetzt, so können in meßbarem Umfang ausgedehnte Defekte erzeugt werden.

Hohe Bestrahlungstemperaturen sind sicherlich für die Bildung ausgedehnter Defekte erforderlich, um eine hinreichend lang andauernde hohe Beweglichkeit der entlang einer Ionenspur vorliegenden Punktdefekte zu gewährleisten. Der Nachweis ausgedehnter Defekte durch TEM- oder RBS-Analysen setzt darüberhinaus voraus, daß die Konzentration an anderen Defekttypen wie Punktdefektclustern nicht zu hoch ist. Diese Bedingung ist ebenfalls bei Hochtemperaturimplantationen im Falle nicht zu großer Projektilmassen erfüllt.

Während die Schädigung durch 2 MeV Si-Ionenbeschuß bei 425 K monoton zunimmt, findet man bei 450 K und im Falle der Ni-Implantation bei 420 und 450 K einheitlich das Durchlaufen eines Maximums (Abb. 2.5 bzw. Abb. 6.5). Da dieser Bereich mit den genannten Defektumwandlungsprozessen verbunden ist, läßt sich schließen, daß solche Prozesse bei der 425 K-Si-Implantation eine untergeordnete Rolle spielen. Daher ist anzunehmen, daß neben der Targettemperatur auch die Ionenmasse oder die deponierten Fremdatome die Defektumwandlung beeinflussen.

Hohe Stapelfehlerdichten werden insbesondere bei den kleinsten betrachteten Dosen ($1 - 2 \times 10^{16}$ Ni/cm²) und dabei vornehmlich im Bereich der Ausläufer des Defektprofils beobachtet. Mit zunehmender Dosis verlagern sich die Tiefenabschnitte hoher Stapelfehlerkonzentration weiter in die Profilflanken, bis nur noch im hinteren Defektausläufer Stapelfehler festgestellt werden können. Diese Beobachtungen lassen den

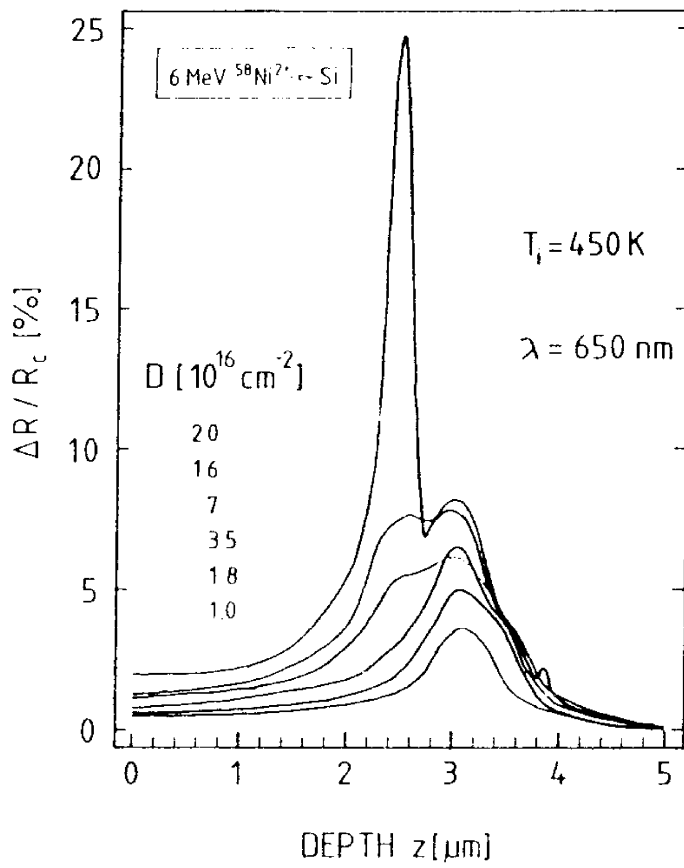
Schluß zu, daß – wie für die 2 MeV Si-Eigenimplantation beschrieben /70,71/ – die Bildung von Stapelfehlern eine Übergangsphase im Defektumwandlungsprozeß darstellt.

Die mit der Umwandlung von Stapelfehlern in Versetzungsschleifen einhergehende Relaxation von Spannungen wird als Ursache angesehen für die bei der 2 MeV Si-Eigenimplantation zu beobachtende Reduzierung des optisch bestimmten Schädigungsgrades, die parallel zur Ausbildung von Versetzungsnetzwerken und dem Verschwinden von Stapelfehlern auftritt. Größere Versetzungskomplexe bilden sich im Falle der 6 MeV Ni-Implantation bei 450 K im Bereich des nuklearen Bremskraftmaximums etwa ab einer Dosis von 5×10^{16} Ni/cm², die zu erwartende Reduzierung der optischen Reflektivitätsänderung wird jedoch offenbar durch den Fremdatomeinfluß auf das optische Signal kompensiert.

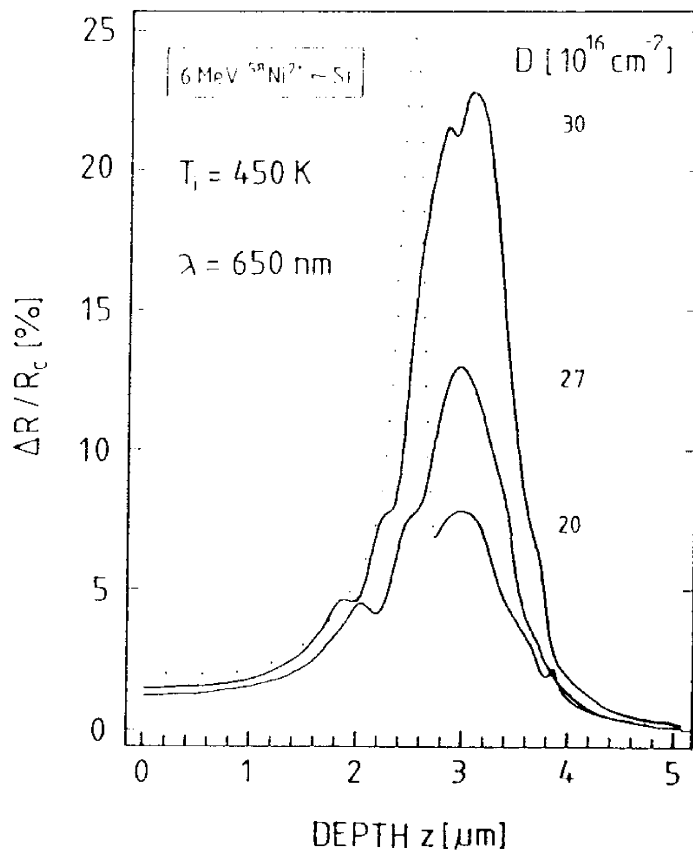
6.2.7 Vorübergehende Amorphisierung bei 450 K

Im Falle der Si-Eigenimplantation bei 450 K endet das Schädigungsstadium eines reduzierten, optisch bestimmten Schädigungsgrades durch das Einsetzen der Amorphisierung bei Dosen oberhalb etwa 3×10^{17} Si/cm² (Abb. 2.5). Dieser Übergang in die Amorphisierung erfolgt durch die Bildung und das Zusammenwachsen amorpher Bereiche, die – anders als im Falle niedrigerer Implantationstemperaturen – aufgrund ihrer Größe ($\varnothing \sim 700\text{--}900$ Å) und der sie umgebenden geordneteren Defektstruktur isoliert beobachtet werden können. Die Amorphisierung beginnt in der Tiefe, in der bei kleinen Dosen das Schädigungsmaximum liegt und in der bei höheren Dosen zuerst die Defektreduzierung einsetzt /70,71/.

Die hier durchgeführten optischen Untersuchungen weisen auf ein deutlich abweichendes Verhalten im Falle der 6 MeV Ni-Implantation hin. Abb. 6.15 zeigt eine weitere Dosisserie von Tiefenprofilen der Reflektivitätsänderung von Proben, die bei 450 K bestrahlt wurden. Im Vergleich zu der in Abb. 6.3 gezeigten Serie wurden bei den in Abb. 6.15 (a) beschriebenen Implantationen 2 - 25 fach höhere Strahlströme (maximal 4 µA) genutzt. Es ergeben sich daraus keine signifikanten Unterschiede für die Profilformen oder -höhen.



a



b

Abb. 6.15
Tiefenprofile der
optischen Reflektiv-
tätsänderung $\Delta R/R_c$
($\lambda = 650 \text{ nm}$) nach 6
MeV Ni-Implantation
bei 450 K,
(a) für Dosen von
 $0.1 - 2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$,
(b) für Dosen von
 $2 - 3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$.

Aus Abb. 6.15 (a) wird deutlich, daß sich zusätzlich zu dem Maximum bei 3.0 μm mit zunehmender Dosis ein zweiter Peak in einer Tiefe von etwa 2.5 μm entwickelt. Dieser Peak ist am stärksten ausgeprägt bei einer Dosis von $2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ und verschwindet bei weiterer Dosiserhöhung (Abb. 6.15 b), während das Maximum bei 3.0 μm unter geringfügiger Verlagerung zu größeren Tiefen (3.1 μm bei $3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$) erheblich ansteigt.

Die Wellenlängenabhängigkeit der Reflektivitätsänderung gibt Hinweise zur Deutung dieser Profilentwicklung.

Abb. 6.16 zeigt eine Wellenlängenserie von Tiefenprofilen der Reflektivitätsänderung für eine Dosis von $1.8 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$. Im Bereich des Profilmaximums ist $\Delta R/R_c$ bei Wellenlängen ab 650 nm nahezu wellenlängenunabhängig, mit abnehmender Wellenlänge bildet sich zunächst

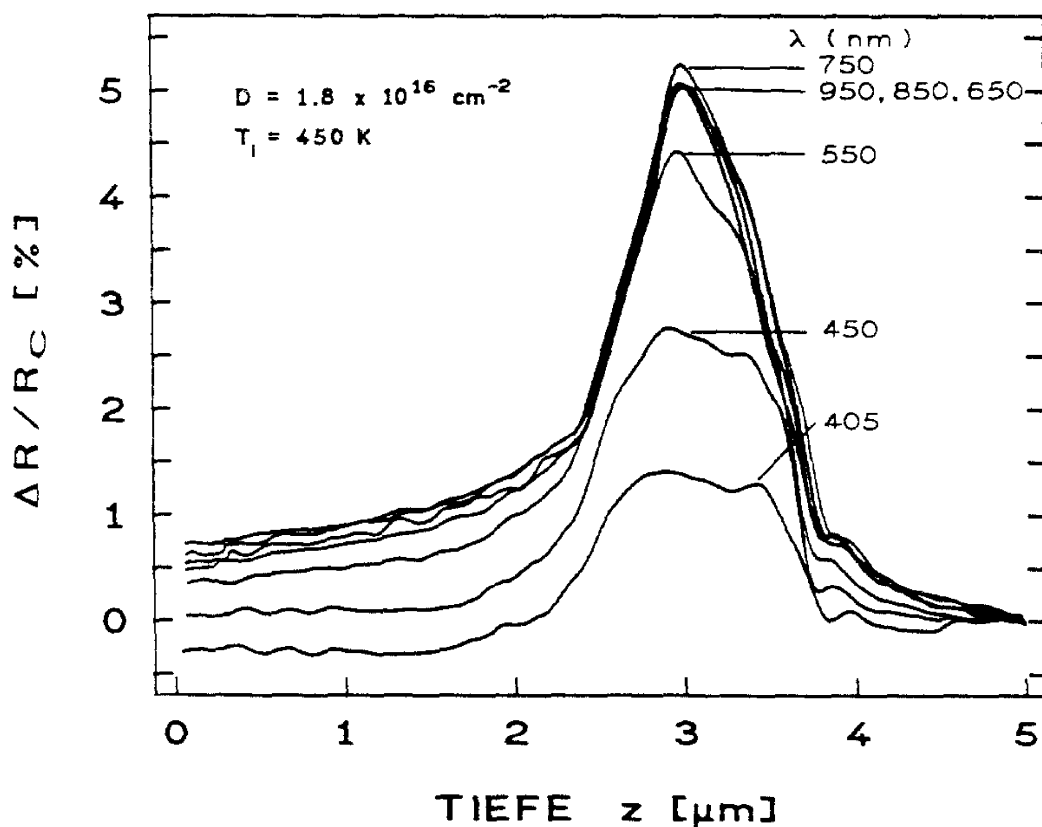


Abb. 6.16

Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung $\Delta R/R_c$ bei verschiedenen Wellenlängen λ ($D = 1.8 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$).

(550 nm) eine Schulter bei etwa 3.25 μm aus. Diese Schulter ist vermutlich sowohl auf die an dieser Stelle zu erwartende hohe Ni-Konzentration (Kap. 6.1) als auch auf die sich in diesen Tiefenbereichen ändernde Defektstruktur (Kap. 6.2.6) zurückzuführen. Das Auftreten wellenlängenunabhängiger Werte von $\Delta R/R_c \approx 0.05$ im Bereich zwischen 650 und 950 nm wird bei Implantationstemperaturen unterhalb 400 K nicht beobachtet.

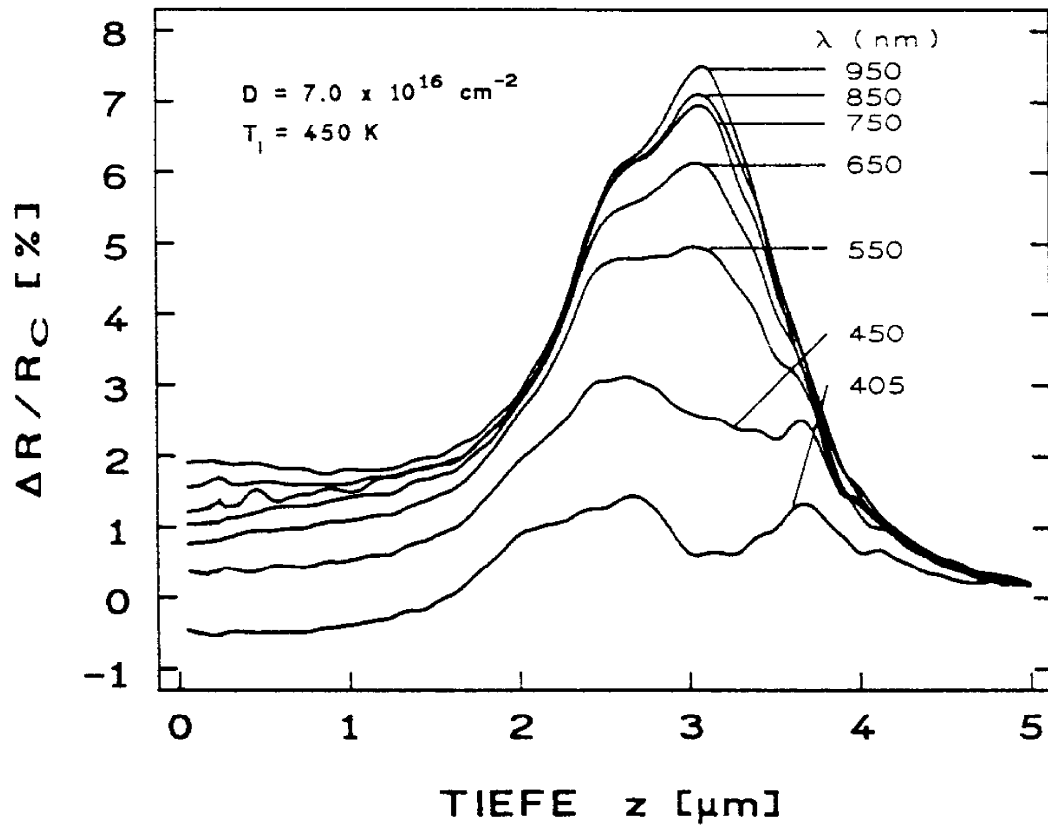
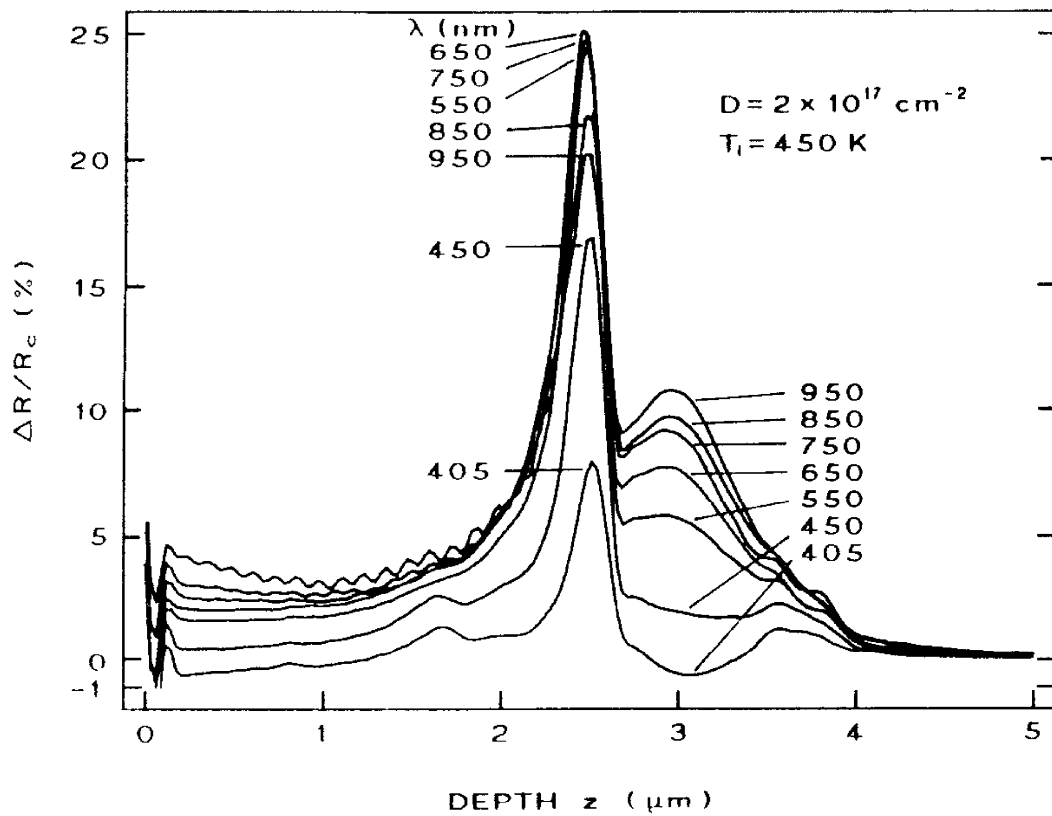


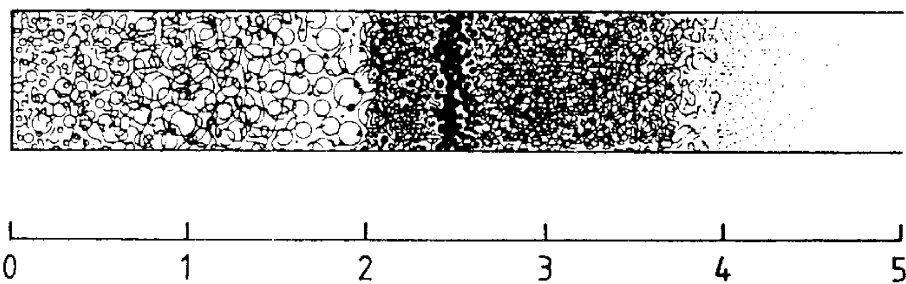
Abb. 6.17

Spektralserie von Tiefenprofilen der optischen Reflektivitätsänderung $\Delta R/R_c$ ($D = 7 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$).

Abb. 6.17 zeigt eine weitere Wellenlängenserie für eine Dosis von $7 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$. Die Reflektivitätsänderung nimmt nun bei $\sim 3.0 \mu\text{m}$ streng monoton mit der Wellenlänge zu, für 405 nm ergibt sich an dieser Stelle ein lokales Minimum. Ein solches Spektralverhalten ist für *reines*, stark strahlengeschädigtes Silizium ($s > 0.1$) ungewöhnlich. Bei $\sim 2.6 \mu\text{m}$ bildet sich eine Schulter aus, die ab $\lambda = 750 \text{ nm}$ einen wellenlängenunabhängigen Wert beibehält.



a)



b)

Abb. 6.18

(a) Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung $\Delta R/R_c$ bei verschiedenen Wellenlängen λ ($D = 2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$).
 (b) Schematische Darstellung der Defektverteilung (● amorphe Bereiche, ○ Versetzungsringe, ~ Versetzungslinien, - Stapelfehler, ⋮ Punktdefektcluster, Δ NiSi_2 -Ausscheidungen).

Am deutlichsten ausgeprägt sind die Unterschiede im Spektralverhalten der Reflektivitätsänderung im Bereich der zwei Extrema bei der Dosis von $2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ (Abb. 6.18 a). Die Schulter im vorderen Profilteil

hat sich nun zu einem schmalen Maximum bei $z = 2.45 \pm 0.07 \text{ } \mu\text{m}$ entwickelt. Hier durchläuft $\Delta R/R_c$ mit zunehmender Wellenlänge ein Maximum bei $\sim 650 \text{ nm}$. Die gemessenen Reflektivitätsänderungen entsprechen dabei Werten, die typisch sind für implantiert-amorphes Silizium (s. Abb. 4.3). Dagegen ist im Bereich um $3.0 \text{ } \mu\text{m}$ Tiefe, ähnlich wie bei einer Dosis von $7 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ und ähnlich wie im Bereich des Profilmaximums bei allen höheren Dosen bis zu $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$, ein streng monotonen Anwachsen von $\Delta R/R_c$ mit zunehmender Wellenlänge zu beobachten.

Dieses unterschiedliche Spektralverhalten bei ~ 2.45 und $\sim 3.0 \text{ } \mu\text{m}$ weist darauf hin, daß die in Abb. 6.15 dargestellte Profilentwicklung auf der Ausbildung unterschiedlicher struktureller Zustände in den betrachteten Tiefenbereichen beruht. Zur Klärung wurden weitere TEM-Analysen durchgeführt, die schematisch in Abb. 6.18 (b) zusammengefaßt sind und nachfolgend beschrieben werden.

Bei einer Dosis von $2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ sind bereits von der Probenoberfläche an bis in Tiefen von $3.5 - 4 \text{ } \mu\text{m}$ Versetzungsringe ($\varnothing \sim 300 - 1400 \text{ } \text{\AA}$) und ungeordnete Versetzungsstrukturen zu beobachten, in größeren Tiefen

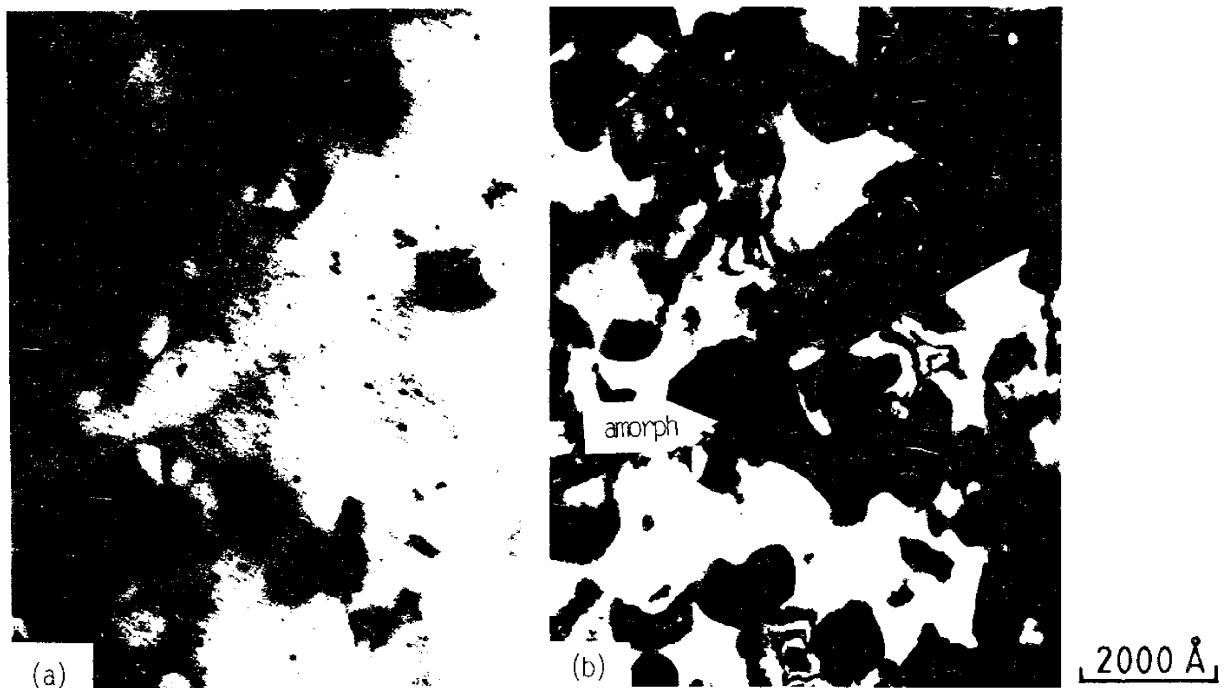


Abb. 6.19

TEM-Hellfeld- (a) / $(\bar{2}20)$ -Dunkelfeld- (b) Aufnahmenpaar isolierter amorpher Bereiche bei $z \approx 2.36 \text{ } \mu\text{m}$.

bis etwa $4.6\text{ }\mu\text{m}$ liegen Punktdefektcluster vor. Wie aufgrund der optischen Untersuchungen erwartet, existiert nahe $z \sim 2.45\text{ }\mu\text{m}$ eine dünne, geschlossene amorphe Schicht. Beträchtliche Dichten isolierter, amorpher Bereiche mit Durchmessern von 500 bis $4000\text{ }\text{\AA}$ lassen sich im Tiefenintervall von ~ 2.3 bis $2.7\text{ }\mu\text{m}$ nachweisen (Abb. 6.19), sehr vereinzelt treten kleinere amorphe Volumina ($\varnothing \leq 200\text{ }\text{\AA}$) auch in geringeren Probentiefen ($\geq 1.7\text{ }\mu\text{m}$) auf.

Zusätzlich zu diesen Gitterschäden lassen sich im Tiefenintervall von ~ 1.8 bis $3.6\text{ }\mu\text{m}$ Ausscheidungen mit Durchmessern bis zu $200\text{ }\text{\AA}$ beobachten. Durch detaillierte Untersuchungen der zugehörigen Beugungsbilder (s. Kap. 6.2.9) lassen sich die in den nicht-amorphisierten Bereichen vorliegenden Präzipitate als *epitaktische NiSi_2 -Ausscheidungen* identifizieren. Diese besitzen vornehmlich Typ-A Orientierung (Kap. 3.3).

Abb. 6.20 zeigt für verschiedene Probentiefen NiSi_2 -Ausscheidungen und zugehörige Feinbereichsbeugungsbilder. Die maximale Konzentration an ausgeschiedenem NiSi_2 beobachtet man in einer Tiefe von $3.0 \pm 0.1\text{ }\mu\text{m}$, in Korrelation zu dem tieferen Extremum der in Abb. 6.18 dargestellten optischen Profile.

Auch innerhalb der amorphen Schicht in $2.45\text{ }\mu\text{m}$ Tiefe liegen NiSi_2 -Ausscheidungen vor, allerdings in merklich geringerer Konzentration (Abb. 6.20 a). Diese Ausscheidungen treten in beliebigen Orientierungen auf, wobei jedoch Orientierungen nahe der des Siliziumwirtskristalls (Typ-A) deutlich bevorzugt sind. Daraus resultieren ungeschlossene Ringe im Beugungsbild (Abb. 6.20 e, f) mit hohen Intensitäten nahe den Positionen, an denen für kristallines NiSi_2 mit Typ-A Orientierung Beugungsreflexe zu erwarten sind (vgl. Abb. 6.20 f und g). Das Auftreten der für Silizium verbotenen (200)-Reflexe (Abb. 6.20 f) erlaubt die Unterscheidung der NiSi_2 -Ausscheidungen von möglichen Si-Kristalliten.

Das Anwachsen der Schädigung bis zur Amorphisierung in einer Tiefe geringen Fremdatomgehalts ($z \approx 2.45\text{ }\mu\text{m}$) parallel zu dem Ausbleiben der Amorphisierung in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft ($z = 3.0 \pm 0.1\text{ }\mu\text{m}$) aber auch wesentlich höherer Ni- bzw. NiSi_2 -Konzentration zeigt deutlich die vom Nickel ausgehende Unterdrückung der Amorphisierung.

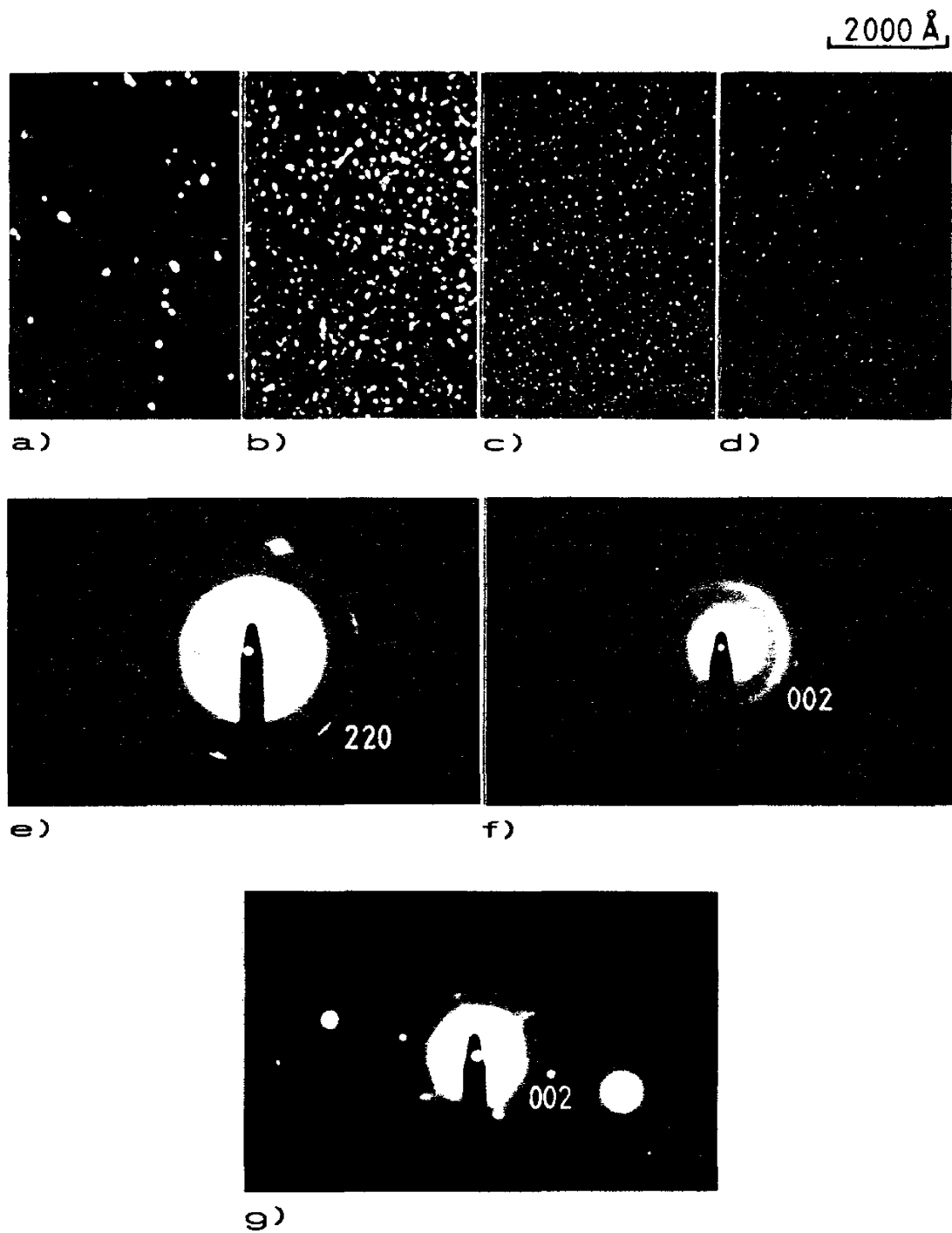


Abb. 6.20

TEM-Aufnahmen für $D = 2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$.

(a)-(d): (002)-Dunkelfeldabbildungen von NiSi_2 -Ausscheidungen in den Tiefen $z = 2.45 \mu\text{m}$ (a), $z = 3.0 \mu\text{m}$ (b), $z = 3.4 \mu\text{m}$ (c), $z = 3.6 \mu\text{m}$ (d).

(e)-(f): Beugungsbilder zu (a) bei Probenorientierungen nahe $[111]$ in (e) bzw. $[110]$ in (f).

(g) : Beugungsaufnahme zu (b) unter $[110]$ -Orientierung.

Anders als in Kap. 6.2.5 wird somit die fremdionenbedingte Unterdrückung der Amorphisierung hier nicht aus der *Temperaturabhängigkeit* einer Meßgröße (D^*), sondern aus der *Tiefenabhängigkeit* der strukturellen Änderungen geschlossen.

Die in der dünnen amorphen Schicht in 2.45 μm Tiefe enthaltenen NiSi_2 -Ausscheidungen sind etwas größer als die im Bereich des NiSi_2 -Maximums. Wie aus ihrer teilweisen Fehlorientierung gegenüber dem Siliziumsubstrat hervorgeht, hat sich ein beträchtlicher Teil dieser Kristallite erst nach Eintreten der Amorphisierung gebildet. Dies bedeutet, daß bereits bei der vorliegenden Dosis von $2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ innerhalb der amorphen Bereiche Kristallisation stattgefunden hat. Bei weiterer Steigerung der Dosis bzw. der Ni-Konzentration kristallisieren die amorphen Bereiche zu einer Siliziumschicht mit epitaktischen NiSi_2 -Ausscheidungen, das mit der amorphen Schicht verbundene Reflektivitätsmaximum bei $z = 2.45 \mu\text{m}$ verschwindet (Abb. 6.15 b). Bis zu einer Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ bilden sich keine weiteren, beobachtbaren amorphen Bereiche.

Auch Campisi et al. /21/ schlagen zur Interpretation ihrer Ergebnisse u.a. eine durch Nickel geförderte Kristallisation vor. Die Autoren untersuchen (100)-Siliziumscheiben nach 170 keV ^{58}Ni -Implantation bei Temperaturen kleiner 70 °C. Für eine Dosis von $1.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ zeigen XTEM-Untersuchungen innerhalb einer amorphen Schicht ein Band von Clustern nahe der projizierten Reichweite. In diesem nickelreichen Band beobachteten die Autoren Kristallite von 20 bis 50 Å Durchmesser, die wegen "der Schwierigkeit, zwischen NiSi_2 und Silizium zu unterscheiden", nicht eindeutig identifiziert werden können. Sie nehmen daher an, daß entweder Nickelsilizidbildung stattgefunden hat oder daß das Silizium aufgrund der Gegenwart von Nickel kristallisiert ist.

Die in der vorliegenden Arbeit dargestellten Untersuchungen lassen vor allem zwei mögliche Mechanismen für die Unterdrückung der Amorphisierung in Betracht kommen.

Mit Dosen von etwa 10^{16} Ni/cm^2 sind bereits Ni-Konzentrationen in einer Größenordnung verbunden, die im Falle anderer Fremdelemente zu einer beträchtlichen Beeinflussung der Kristallisationsgeschwindigkeit

amorpher Si-Schichten führen kann, so daß eine durch die Gegenwart von Nickelatomen beschleunigte spike-Kristallisation denkbar erscheint (Kap. 6.2.5). Dies steht auch in Einklang mit der bei hohen Temperaturen zu beobachtenden starken Abnahme des Modellparameters A_s , der die Stimulierung des Wachstums amorpher Keime beschreibt (Kap. 6.2.4).

Die Annahme, daß die Gegenwart von Nickelatomen die Kristallisation von Silizium begünstigt, wird besonders auch durch ein Modell /205/ gestützt, das entwickelt wurde, um die hohe Reaktivität von Siliziumoberflächen mit Nickel und die sequentielle Bildung von Metallsiliziden (Kap. 3.2) durch Niedrigtemperaturbehandlung von Si/Ni-Schichtsystemen zu erklären. Dazu wird angenommen, daß Nickel auf die Zwischengitterplätze des Siliziums in einer Ni/Si-Schichtstruktur diffundiert, in Einklang mit der niedrigen Aktivierungsenergie (1.2 eV /206/) für die Zwischengitterdiffusion von Nickel in Silizium. Solch ein Ni-Zwischengitteratom erhöht die Anzahl nächster Nachbarn in seinem Wirtsgitter. Die Elektronen einer kovalenten Si-Si-Bindung geben demnach ihre lokalisierten Zustände auf und werden auf das Ni-Zwischengitteratom und die Si-Atome verteilt, was zu untersättigten Si-Si-Bindungen führt. Untersättigte Bindungen haben einen eher metallischen Charakter, d.h. sie sind weniger gerichtet und einfacher zu brechen und wiederherzustellen.

Eine daraus resultierende höhere Mobilität von Siliziumatomen an der Ni/Si-Grenzschicht wird als Ursache für das schnelle Wachstum von Silizidfilmen bei niedrigen Temperaturen angesehen /205/. Da unter Zugrundelegung eines solchen Mechanismus die Mobilität einer metallreichen Silizid/Silizium-Grenzschicht besonders hoch sein sollte, erscheint es plausibel, daß (zumindest bei der Reaktion dicker Nickelfilme auf Silizium) zuerst metallreiche Silizide gebildet werden. Das Modell wurde inzwischen ebenfalls herangezogen, um die Umverteilung von Dotieratomen im Silizium während des Wachstums von Halbedelmetallsilizidfilmen zu erklären /96/. Zahlreiche experimentelle Befunde, die dieses Modell stützen, werden von Erskine et al. /137/ zusammengefaßt.

Entsprechend dieser Argumentation wäre eine Unterdrückung der Amorphisierung auf eine durch die Gegenwart einer hohen Konzentration an Nickel-Zwischengitteratomen bedingte Veränderung der Si-Si-Bindungen in Richtung eines mehr metallischen Bindungscharakters zurückzuführen, die eine einfachere Wiederherstellung fehlgeordneter Bindungen ermöglicht.

Ein weiterer, möglicherweise auch parallel wirksamer Mechanismus berücksichtigt die strukturelle Ähnlichkeit zwischen Silizium und den sich während der Implantation bildenden NiSi_2 -Ausscheidungen:

Untersuchungen /109-111/ zur Strahlenschädigung konventionell hergestellter NiSi_2 -Filme zeigen, daß NiSi_2 wahrscheinlich aufgrund seines metallischen Bindungscharakters erheblich schwerer zu amorphisieren ist als Silizium. Die kritische Dosis zur Amorphisierung von NiSi_2 durch Beschuß mit 100 keV Ar-Ionen bei Raumtemperatur ist um einen Faktor 10 höher als die Amorphisierungsdosis von Silizium /111/. Als Aktivierungsenergie für die epitaktische Kristallisation nahezu amorpher NiSi_2 -Schichten werden Werte von $1.2 - 1.4 \pm 0.2$ eV angegeben /109,110/, gegenüber 2.35 eV für die Kristallisation von amorphem Silizium /207/.

Liegen daher einmal NiSi_2 -Ausscheidungen vor, so könnten diese schwer zu amorphisierende Bereiche darstellen, die aufgrund ihrer Gitterstruktur auch als *Keim* für eine epitaktische Kristallisation von geschädigtem Silizium dienen könnten.

Aufgrund der geringen Dosen, bei denen im Falle der Implantation bei 400 K bereits ein Einfluß von Nickel auf die Amorphisierung bemerkbar wird, und dem damit verbundenen kleinen Volumenanteil, den NiSi_2 -Kristallite dann einnehmen könnten, ist der erstgenannten Interpretation der Vorzug zu geben.

Die Bildung von NiSi_2 -Ausscheidungen und ihre Tiefenverteilung in 450 K-Implantaten sollen im folgenden näher betrachtet werden.

6.2.8 Einfluß von Strahlenschäden auf die Bildung von NiSi₂-Ausscheidungen

Die in Kap. 6.1 dargestellten Untersuchungen an Tieftemperatur-Hochdosisimplantaten ($D = 2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$) lassen als Tiefe maximaler Nickelkonzentration einen Wert von $3.3 \pm 0.15 \text{ } \mu\text{m}$ erwarten.

Die im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen TEM-Untersuchungen an 450 K-Implantaten gleicher Dosis zeigen hingegen das Maximum der NiSi₂-Verteilung bei $3.0 \pm 0.1 \text{ } \mu\text{m}$, d.h. in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft bzw. der Tiefe maximaler Strahlenschädigung bei kleinen Dosen. Die vorhandene hohe Ausscheidungsichte legt nahe, daß sich an dieser Stelle gleichzeitig das Maximum der Ni-Konzentration befindet. Die Untersuchungen der Wellenlängenabhängigkeit von $\Delta R/R_c$ geben Hinweise darauf, daß sich ähnliche strukturelle Zustände wie für $3 \text{ } \mu\text{m}$ Tiefe und eine Dosis von $2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ in der gleichen Tiefenregion bereits bei kleineren Dosen ausbilden. Beispielsweise findet man bereits für Dosen von $7 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ bei $3.0 \text{ } \mu\text{m}$ – wenn auch weniger deutlich ausgeprägt als bei $D = 2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ – monoton mit der Wellenlänge ansteigende Reflektivitätsänderungen (Abb. 6.17).

Die Ausbildung des NiSi₂- bzw. Ni-Konzentrationsmaximums bei 3.0 statt bei $3.3 \text{ } \mu\text{m}$ Tiefe legt die Annahme nahe, daß die an dieser Stelle mit maximaler Konzentration gebildeten Defekte als Nukleationszentren für NiSi₂ und als Senken für diffundierende Nickelatome wirken.

Eine Senkenwirkung von Strahlenschäden auf Metallatome ist als Gettern bekannt und wird beispielsweise bei der Herstellung von Halbleiter-Bauelementen ausgenutzt, um in einem Temperprozeß metallische Verunreinigungen unterhalb der aktiven Schichten oder sogar nahe der Wafer-rückseite zu binden. Ein Überblick über das Getterverhalten verschiedener Metalle in Silizium sowie über Gettermodelle findet sich in /208/.

Nickel bildet zusammen mit Kupfer die Klasse der am stärksten durch Strahlenschäden zu getternden Elemente, was auf deren schnelle interstitielle Diffusion und niedrige Löslichkeit in Silizium zurückgeführt wird /209,210/. Über die Art der am Getterprozeß beteiligten Gitterdefekte wird in diesen Arbeiten keine Aussage gemacht.

Die TEM-Untersuchung von Proben geringer Dosis im Bereich des nuklearen Bremskraftmaximums sowie von Hochdosisproben im Bereich kleiner NiSi_2 -Konzentration ergibt deutliche Korrelationen zwischen der räumlichen Anordnung von Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen und dem Verlauf von Versetzungen.

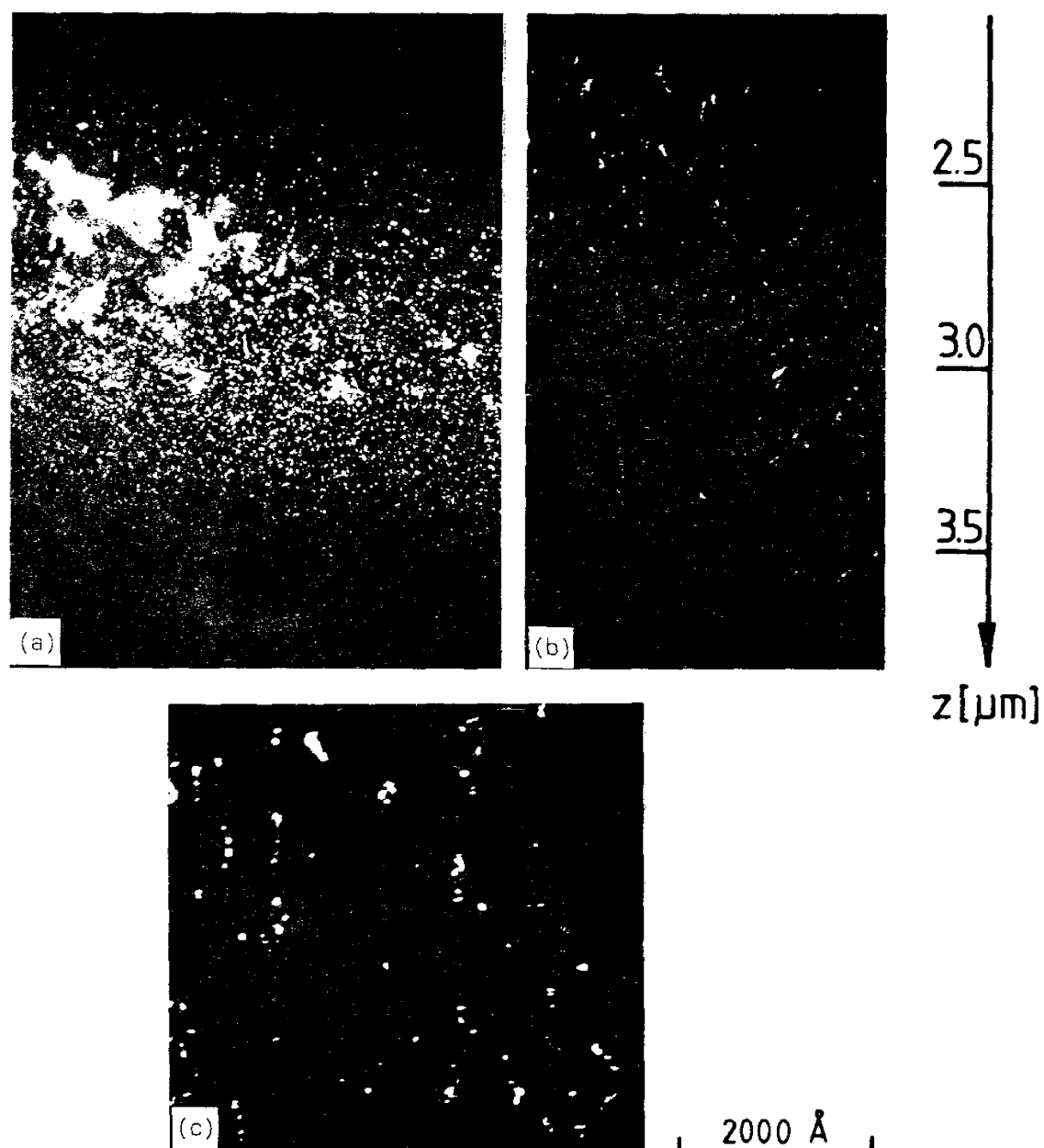


Abb. 6.21

XTEM-Dunkelfeldaufnahmen der NiSi_2 -Ausscheidungen (Typ-A) bei einer Dosis von $5 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). Oberflächennormale $\parallel [\bar{1}10]$. (a) $\vec{g} = (200)$, Probenorientierung $[010]$, (b) $\vec{g} = (202)$, ca. 6° gegen (a) verkippt. (c) zeigt eine Ausschnittsvergrößerung von (b).

Abb. 6.21 (a) zeigt beispielhaft Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen im Tiefenbereich nahe dem Profilmaximum einer mit $5 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ bestrahlten Probe. Dies ist die kleinste Dosis, bei der nach 6 MeV Ni-Implantation bei 450 K Typ-A NiSi_2 identifiziert werden kann. Insbesondere im Bereich kleiner Ausscheidungsichte fällt auf, daß ein beträchtlicher Anteil der Präzipitate ($\varnothing \approx 80 \text{ \AA}$) ringförmig oder linienhaft angeordnet ist, und zwar, wie durch Vergleich mit Abb. 6.21 (b) zu ersehen, entlang der hier vorliegenden Versetzungsringe und -linien. Zur Verdeutlichung sind mit Typ-A NiSi_2 dekorierte Versetzungen in einer Ausschnittsvergrößerung (Abb. 6.21 c) dargestellt. Die zur gleichzeitigen Anregung von Versetzungen und NiSi_2 -Ausscheidungen notwendigen Anregungsbedingungen sowie die intensitätsbedingten langen Belichtungszeiten wirken hier einer besseren Abbildungsqualität entgegen.

Über eine Getterwirkung von Versetzungen auf Nickel wird inzwischen auch von anderen Autoren berichtet. Lee et al. /211/ erzeugen geordnete Netzwerke von Fehlpassungsversetzungen an den Grenzflächen einer im CVD-Verfahren hergestellten epitaktischen Si/Si(2% Ge)/Si-Schichtstruktur. Nach Eindiffusion von Nickel bei Temperaturen zwischen 600 und 1000 °C werden 50 bis 100 Å große Ausscheidungen an den Versetzungen bzw. in Kolonien nahe den Versetzungen beobachtet. Die Autoren nehmen an, daß die Ausscheidungen in Form eines Silizids vorliegen. Mit abnehmender Diffusionstemperatur verringern sich die Kolonien und die Dekoration der Versetzungen wird gleichförmiger. Es wird vorgeschlagen, dies zur Herstellung vergrabener Mikrodrähte auszunutzen.

Die hier exemplarisch dargestellten Untersuchungen zeigen, daß die bei der Bestrahlung erzeugten Versetzungen die Keimbildung für Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen fördern.

Neben den hochreinen Bedingungen, unter denen Nickel und Silizium bei der Implantation miteinander in Kontakt gebracht werden, kann dies dazu beitragen, daß die Bildung von NiSi_2 bei verhältnismäßig geringen Temperaturen erfolgt, verglichen mit den Temperaturen bei der (keimbildungsbeschränkten) NiSi_2 -Schichtsynthese durch Tempern dicker Nickelfilme auf Siliziumkristallen (Kap. 3.2). In Anbetracht der geringeren NiSi_2 -Bildungstemperaturen, die bei der Ni-Dünnschichtdeposition unter UHV-Bedingungen beobachtet werden und im Hinblick auf die Diskussion über eine mögliche NiSi_2 -Bildung bei Raumtemperatur (Kap. 3.2) erscheint das Auftreten von NiSi_2 nach Implantation bei 450 K allerdings weniger erstaunlich. Die

Begünstigung der Keimbildung an Versetzungen ist vor dem Hintergrund der geänderten Spannungsverhältnisse in der Umgebung solcher Defekte zu betrachten /212/. Eine Diskussion der mit der NiSi_2 -Keimbildung verbundenen Gitterverzerrung erfolgt in Kap. 6.2.9.

Da Versetzungen zuerst merklich im Bereich des nuklearen Bremskraftmaximums erzeugt werden (Kap. 6.2.6), ist es denkbar, daß mit ihrer Bildung eine Verlagerung des Ni-Profiles in diese Tiefenzone ausgelöst wird. Es ist jedoch nicht auszuschließen, daß auch andere dort gebildete Defekte eine entsprechende Wirkung auf diffundierendes Nickel haben.

Aus den durch Extrapolation der Diffusionsdaten verschiedener Autoren /206,213/ abzuschätzenden Diffusionskoeffizienten für interstitielles Nickel in ungeschädigtem Silizium bei 450 K ergeben sich Diffusionslängen von $\sim 1 \text{ \AA}$ bzw. $\sim 60 \text{ \mu m}$ für eine Stunde. Somit ist eine zuverlässige Beurteilung der Frage, ob gewöhnliche Diffusion hinreichend schnell ist, um während der Bestrahlung zu entsprechenden Profilverlagerungen zu führen, an Hand der für diese Temperaturen verfügbaren Daten nicht möglich.

Das bei Dosen bis zu $2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ erzeugte Tiefenprofil von NiSi_2 -Ausscheidungen beeinflusst offenbar die Tiefenverteilung von Ausscheidungen nach weiterer Dosissteigerung. Ausscheidungsverteilungen werden, insbesondere für höhere Dosen, im anschließenden Abschnitt vorgestellt und diskutiert.

6.2.9 Charakterisierung von NiSi_2 -Ausscheidungen und ihrer Tiefenverteilung bei 450 K-Implantationen

Abb. 6.22 zeigt XTEM-Aufnahmen der Defekt- (a) und Ausscheidungsverteilung (b-d) einer bei 450 K mit $3 \times 10^{17} \text{ Ni-Ionen/cm}^2$ bestrahlten Siliziumprobe im Tiefenbereich zwischen etwa 2 und 4 μm . An der gleichen Probe aufgenommene Feinbereichsbeugungsbilder finden sich in Abb. 6.23 und 6.25.

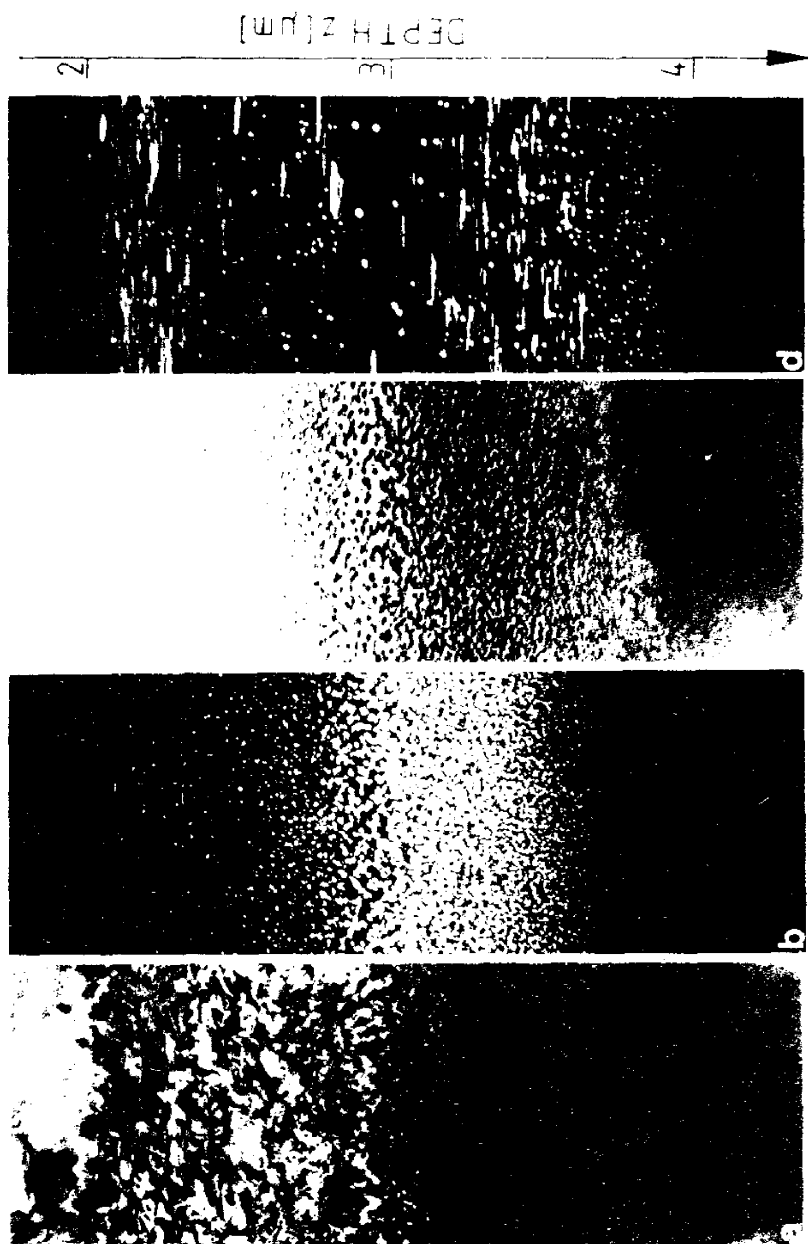


Abb. 6.22
XTEM-Abbildungen der Schichtstruktur für eine Dosis von $3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$).
(a) Dynamisches Hellfeld; (b) kinematisches (200)-Dunkelfeld der Typ-A NiSi₂-Aus-
scheidungen; (c) Hellfeld für die Verteilung von Typ-B NiSi₂-
Kristalliten und Plättchen, aufgenommen unter Verwendung von Intensität aus einem
Typ-B Reflex und einem streak (Pfeil in Abb. 6.23 a). Oberflächennormale und
Probenorientierung $\parallel [01\bar{1}]$, in (b) und (c) leicht dagegen verkippt.

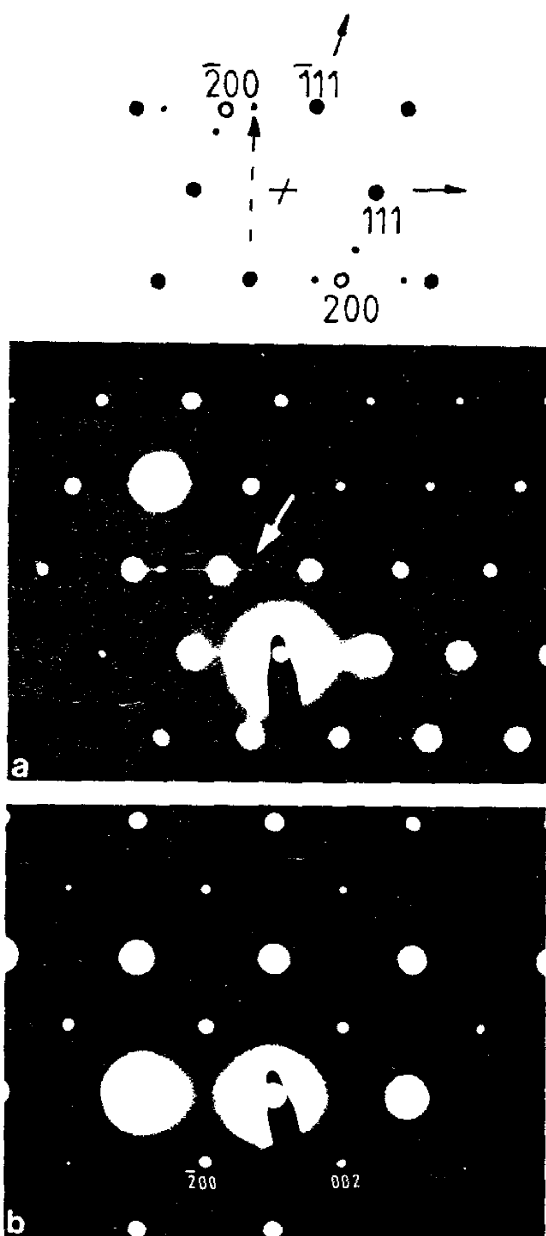


Abb. 6.23

Feinbereichsbeugungsaufnahmen der in Abb. 6.22 dargestellten Ausscheidungsschicht;

(a) in $[01\bar{1}]$ -Orientierung;
(b) in $[010]$ -Orientierung.

Der Pfeil in (a) kennzeichnet den für Abb. 6.22 (d) benutzten Reflex $\vec{g} = (1\bar{1}\bar{1})_{[111] \text{ Typ-B NiSi}_2}$. Das Beugungsschema zu (a) wird im Text erläutert.

Die Beugungsbilder von 450 K-Hochdosisproben sind dadurch gekennzeichnet, daß im Bereich der Ausscheidungsverteilung neben den für Silizium erlaubten Reflexen auch solche auftreten, die für ein Diamantgitter verboten, für ein fcc-Gitter jedoch erlaubt sind. Beispielsweise sind dies die $\{200\}$ -Reflexe in $\langle 011 \rangle$ -Beugungsmustern (Abb. 6.23 a) oder zusätzlich auch die $\{420\}$ - und $\{600\}$ -Reflexe in $\langle 100 \rangle$ -Beugungsbildern (schwache Reflexe in Abb. 6.23 b). Das Auftreten dieser Reflexe ist charakteristisch für epitaktische NiSi_2 -Ausscheidungen in Typ-A-Orientierung (Kap. 3.3), die

aufgrund ihrer CaF_2 -Struktur und der nahezu gleichen Gitterkonstanten zu Silizium nur an Hand solcher Reflexe identifiziert werden können. Da für NiSi_2 erlaubte, für Silizium jedoch verbotene Reflexe nicht in allen Beugungsmustern vorkommen, können NiSi_2 -Ausscheidungen nur unter wenigen Probenorientierungen im Dunkelfeldabbildungsmodus sichtbar gemacht werden, z.B. unter $\langle 011 \rangle$ -Orientierungen.

Bei dynamischen Anregungsbedingungen wie in Abb. 6.23 (a) kann in einem $[01\bar{1}]$ -Beugungsbild z.B. der (200)-Reflex auch durch Doppelbeugung in $[111]$ - und $[1\bar{1}\bar{1}]$ -Richtung erzeugt werden (Abb. 6.24).

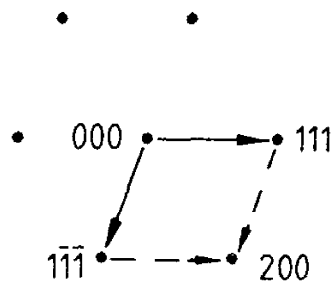


Abb. 6.24

Anregung eines (200)-Reflexes durch Doppelbeugung.

Eine solche Umweganregung stört und sollte daher bei der Dunkelfeldabbildung von Typ-A NiSi_2 unterdrückt werden. Dies läßt sich erreichen, indem man durch Verkippen der Probe gegen die exakte $[01\bar{1}]$ -Orientierung für eine schwache Anregung der beteiligten $\{111\}$ -Reflexe sorgt. Abb. 6.25 zeigt, daß die Intensität von $\{200\}$ - und $\{600\}$ -Reflexen in diesem Fall nur dann hoch ist, wenn das Beugungsbild in einem Bereich hoher Ausscheidungsichte erzeugt wird.

Eine mit einem kinematisch angeregten (200)-Reflex aufgenommene Dunkelfeldabbildung der Tiefenverteilung von Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen ist in Abb. 6.22 (b) für die Dosis von $3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ dargestellt, die zugehörige Hellfeldaufnahme ist in Abb. 6.22 (c) zu sehen. Typ-A NiSi_2 -Präzipitate lassen sich im Tiefenintervall zwischen ~ 1.8 und $4.0 \mu\text{m}$ nachweisen. Die maximale NiSi_2 -Kristallitdichte befindet sich bei etwa $3.1 \mu\text{m}$ Tiefe. Dagegen liegen die größten Kristallite ($\varnothing \sim 300 \text{ \AA}$) bei etwa $3.0 \mu\text{m}$ vor.

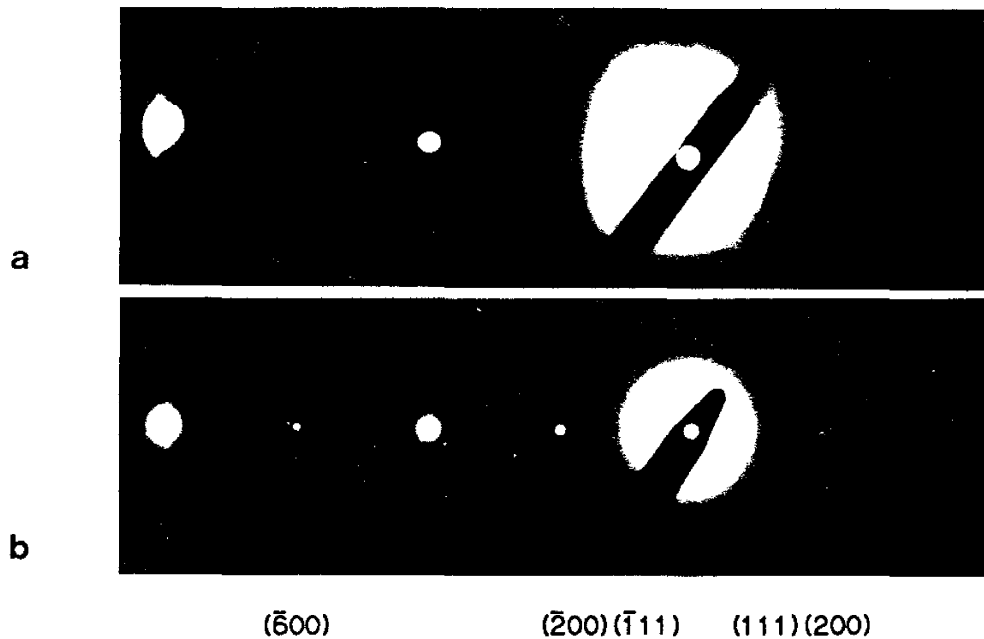


Abb. 6.25

Feinbereichsbeugungsaufnahmen zu der in Abb. 6.22 gezeigten Probe bei gleicher Verkippung gegen die exakte $[01\bar{1}]$ -Orientierung; (a) in einem Bereich ohne NiSi_2 nahe der Oberfläche; (b) im Bereich der NiSi_2 -Ausscheidungen. Man beachte die Intensität der (200) -Reflexe sowie das Auftreten aufgespaltener $\{111\}$ -Reflexe in (b).

Außer diesen polyedrischen Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen treten in deutlich geringerer Dichte entsprechende Kristallite in Typ-B Orientierung ("Zwillingsorientierung", s. Kap. 3.3) sowie plättchenförmige NiSi_2 -Ausscheidungen auf (Abb. 6.22 d).

Die Typ-B NiSi_2 -Polyeder verursachen in dem in Abb. 6.23 (a) gezeigten Beugungsbild eine Überlagerung mit zwei zusätzlichen $\langle 011 \rangle$ -Beugungsmustern (schwache Reflexe), die mit dem $[01\bar{1}]$ -Beugungsbild von Typ-A NiSi_2 bzw. Silizium (starke Reflexe) durch eine 180° -Rotation um die $[111]$ - bzw. $[\bar{1}\bar{1}1]$ -Achse verknüpft sind.

Dieser Zusammenhang soll exemplarisch für einen Typ-B NiSi_2 - $(1\bar{1}\bar{1})$ -Reflex anhand des in Abb. 6.23 schematisch gezeichneten $[01\bar{1}]$ -Beugungsmusters veranschaulicht werden. Hierin sind die $[111]$ - und $[\bar{1}\bar{1}1]$ -Kristallrichtungen von Silizium durch geschlossene Pfeile gekennzeichnet. Durch eine 180° -Rotation um die $[111]$ -Achse geht der $(1\bar{1}\bar{1})$ -Reflex von

Silizium bzw. Typ-A NiSi_2 in *den* Typ-B NiSi_2 -Reflex über, der durch den unterbrochen eingezeichneten Pfeil markiert ist. Dieser auch in Abb. 6.23 (a) gekennzeichnete Reflex wurde für die Dunkelfeldaufnahme in Abb. 6.22 (d) benutzt.

Die Überlagerung mit mehreren $\langle 011 \rangle$ -Beugungsmustern (Abb. 6.23) ist eine Folge der unterschiedlichen $\langle 111 \rangle$ -Richtungen, bezüglich derer eine Zwillingsorientierung möglich ist (Anhang C). Eine Bevorzugung einer bestimmten Typ-B Orientierung kann bei den polyedrischen Ausscheidungen nicht festgestellt werden.

In $\langle 100 \rangle$ -Beugungsbildern wie in Abb. 6.23 (b) erzeugt Typ-B NiSi_2 keine Reflexe zusätzlich zu denen von Typ-A NiSi_2 (Anhang C). Aus diesem Grunde werden die Proben zur Untersuchung von NiSi_2 -Tiefenverteilungen im folgenden meist aus einer $\langle 011 \rangle$ -Richtung betrachtet.

Die plättchenförmigen Ausscheidungen rufen in $[01\bar{1}]$ -Beugungsbildern nadelförmige Intensitätsverteilungen (streaks) in $[111]$ - und $[\bar{1}11]$ -Richtungen hervor (Abb. 6.23 a). Die Plättchen liegen folglich auf (111) - und $(\bar{1}11)$ -Ebenen. Ein Verkippen der Probe (z.B. um die $[100]$ -Richtung) führt zu einer Verkürzung der streaks zu Reflexen, die entsprechend ihres Schnittpunktes mit der Ewald-Kugel bei der Kippung der Probe wandern (Kap. 4.4.1). Weiterhin beobachtet man in gekippter Probenlage ein Aufspalten der nun nur noch schwach angeregten $\{111\}$ -Reflexe in $[100]$ - und $[\bar{1}00]$ -Richtung (Abb. 6.25 b, vgl. auch Abb. 6.20 g). Dieses "splitting" (Kap. 4.4.1) beruht auf dem Vorliegen von streaks in $[1\bar{1}1]$ - und $[11\bar{1}]$ -Richtung, die nun die Ewald-Kugel außerhalb der $\{111\}$ -Reflexe schneiden.

Dies zeigt, daß plättchenförmige Ausscheidungen auch auf den übrigen $\{111\}$ -Ebenen vorliegen. Große Plättchen mit Durchmessern bis zu 2000 Å lassen sich allerdings bevorzugt auf der (111) -Ebene parallel zur (111) -Probenoberfläche beobachten.

Aufgrund der großen Ausdehnung der streak-Intensitätsverteilung über oftmals einen vollständigen reziproken Netzebenenabstand (Abb. 6.23 a) ist eine Zuordnung der streaks zu Typ-A oder Typ-B Reflexen und somit eine Festlegung des Orientierungszusammenhanges (Typ-A/B) schwierig. NiSi_2 -Plättchen lassen sich im dynamischen Dunkelfeld stets dann stark anregen, wenn zur Abbildung Intensität aus einem streak-Abschnitt

verwendet wird, der auf einem gleichzeitig stark angeregten Typ-B Reflex liegt (Abb. 6.22 d). Sie sind jedoch weniger stark anregbar, wenn zur Abbildung ein Typ-A Reflex benutzt wird, so daß davon auszugehen ist, daß das Maximum der streak-Intensitätsverteilung am Ort der Typ-B Reflexe liegt.

Die Plättchen weisen folglich Typ-B Kristallorientierung auf, wobei die Plättchennormale zugleich Zwillingsachse ist. Die Typ-B Orientierung der Plättchen zeigt sich auch in weiter unten beschriebenen Untersuchungen.

Durch Betrachtung der Plättchen aus der $[01\bar{1}]$ -Richtung kann ein Maximalwert für die Plättchendicke abgeschätzt werden, da auf (111) - und $(\bar{1}\bar{1}1)$ -Netzebenen liegende Plättchen dann hochkant stehen. Unter annähernd exakter Orientierung erhält man Kontrastbreiten von minimal 11 \AA (Abb. 6.26). Dieser Wert stellt eine obere Grenze für die Dicke der dünnsten Plättchen dar. Auch die Ausdehnung der streak-Intensitätsverteilung im reziproken Raum ist ein Maß für die Plättchendicke (Abb. 4.11). Nimmt man anhand von Beugungsaufnahmen wie in Abb. 6.23 (a) eine Halbwertsbreite von $\geq 0.5 \times |\vec{g}_{111}|$ an, so erhält man eine maximale Plättchendicke von zwei Netzebenenabständen d_{111} , d.h. $\approx 6.2 \text{ \AA}$.

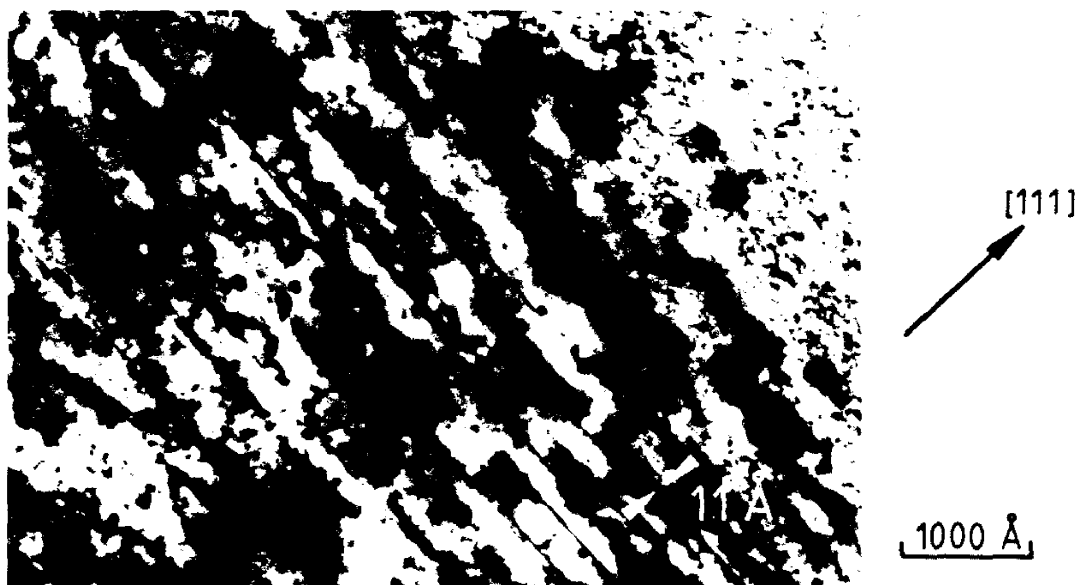


Abb. 6.26

Hellfeldabbildung hochkant stehender NiSi_2 -Plättchen ($D = 3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$, $z \approx 2.1 \text{ \mu m}$, Probennormale und -orientierung $\parallel [01\bar{1}]$).

Bei der hier betrachteten Dosis von $3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ ist die insgesamt vorliegende Menge an Typ-B NiSi_2 gering im Vergleich zu der an Typ-A NiSi_2 . Es soll betont werden, daß Typ-B orientierte NiSi_2 -Ausscheidungen und NiSi_2 -Plättchen zwar auch im Bereich des NiSi_2 -Profilmaximums vorkommen, jedoch bevorzugt in den Profilausläufern zu finden sind. Solch ein Verhalten ist charakteristisch auch für höhere Dosen.

Abb. 6.27 zeigt Tiefenverteilungen von Typ-A und Typ-B orientierten NiSi_2 -Präzipitaten für eine Dosis von $5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$. Ausscheidungen können nun in einem nahezu unverändertem Tiefenintervall von ~ 1.7 bis $4.1 \mu\text{m}$ beobachtet werden. Ähnlich wie für $3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ befinden sich die größten Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen in einer Tiefe von etwa $2.8 - 3.1 \mu\text{m}$. Sie erreichen dort im Mittel etwas größere Durchmesser von nun etwa 300 \AA . Die NiSi_2 -Dichte im Bereich des Maximums hat deutlich zugenommen, die maximale NiSi_2 -Konzentration ist bei $3.2 \pm 0.2 \mu\text{m}$ zu beobachten. Die vordere "Plättchenschicht" hat sich merklich zur Oberfläche verlagert und befindet sich nun in einem Tiefenintervall zwischen ~ 1.7 und $\sim 2.1 \mu\text{m}$ ($2.1 - 2.3 \mu\text{m}$ für $D = 3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$).

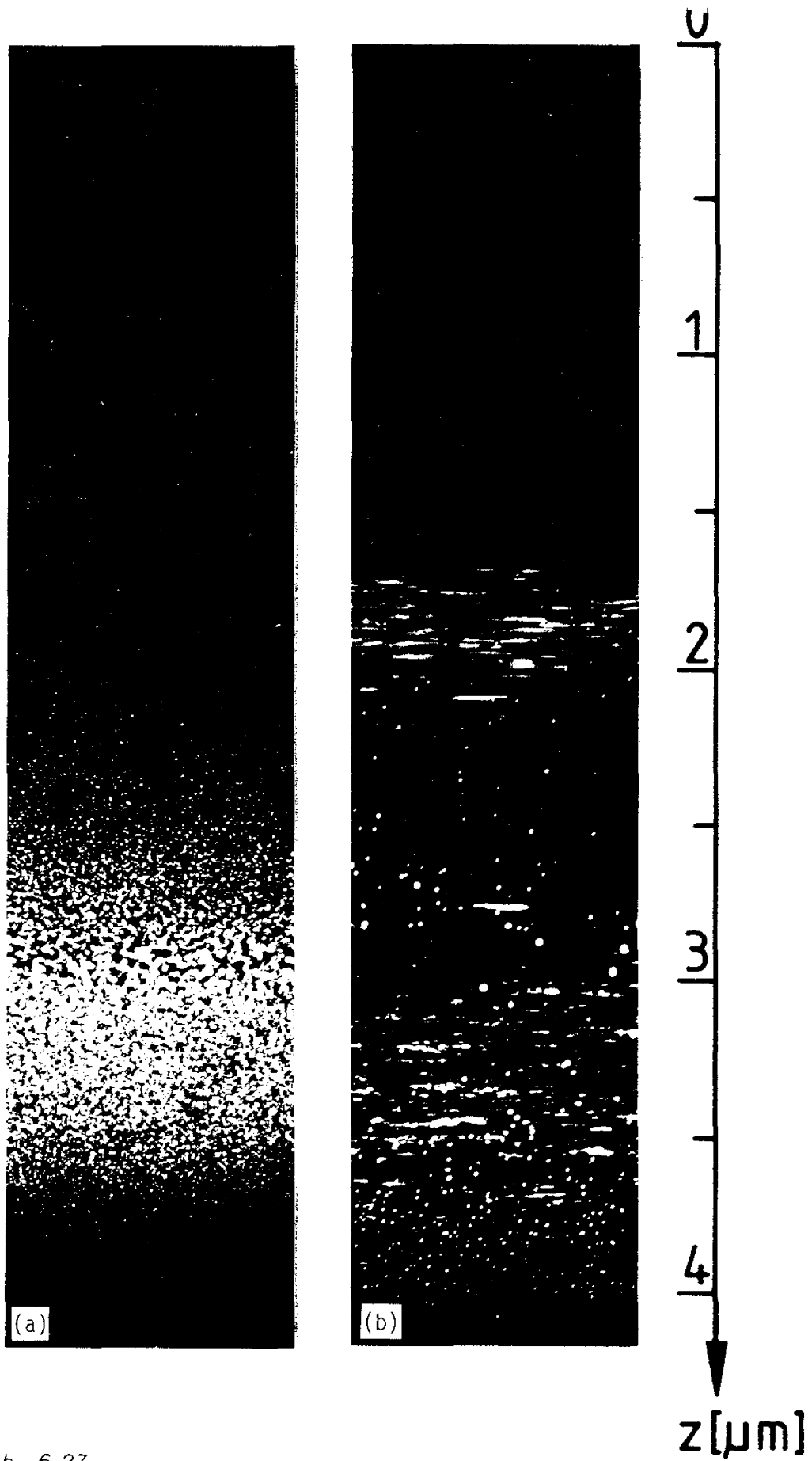
Weitere Dosissteigerungen führen zu einer Verbreiterung des Tiefenintervalls, in dem NiSi_2 -Ausscheidungen zu beobachten sind, sowie zu einer Erhöhung der NiSi_2 -Konzentration im Profilmaximum.

Abb. 6.27

=>

XTEM-Dunkelfeldaufnahmen der Typ-A (a) bzw. Typ-B NiSi_2 -Tiefenverteilung (b) für eine Dosis von $5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). Probennormale $\parallel [23\bar{5}]$, Orientierung $\parallel [01\bar{1}]$.

$\vec{g} = (200)$ in (a); $\vec{g} = (\bar{1}\bar{3}\bar{3})_{[111]\text{Typ-B } \text{NiSi}_2}$ in (b).



← Abb. 6.27

Bei einer Dosis von $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ läßt sich im Bereich des NiSi_2 -Profilmaximums ein Zusammenwachsen einzelner Präzipitate feststellen (Abb. 6.28). Dies betrifft sowohl die größeren Ausscheidungen ($\varnothing \sim 400 \text{ Å}$) in der "Tiefenzone größerer Ausscheidungsstruktur" zwischen ~ 2.8 und 3.1 µm als auch die Präzipitate in der sich zwischen ~ 3.1 und 3.4 µm anschließenden Zone höherer NiSi_2 -Dichte. Die Lage des NiSi_2 -Konzentrationsmaximums wurde an besonders dünnen Probenstellen zu $3.2 \pm 0.1 \text{ µm}$ bestimmt.

Die vordere Zone plättchenförmiger Ausscheidungen ist bei dieser Dosis noch weiter zur Oberfläche verlagert und erstreckt sich zwischen ~ 1.3 und 1.8 µm .

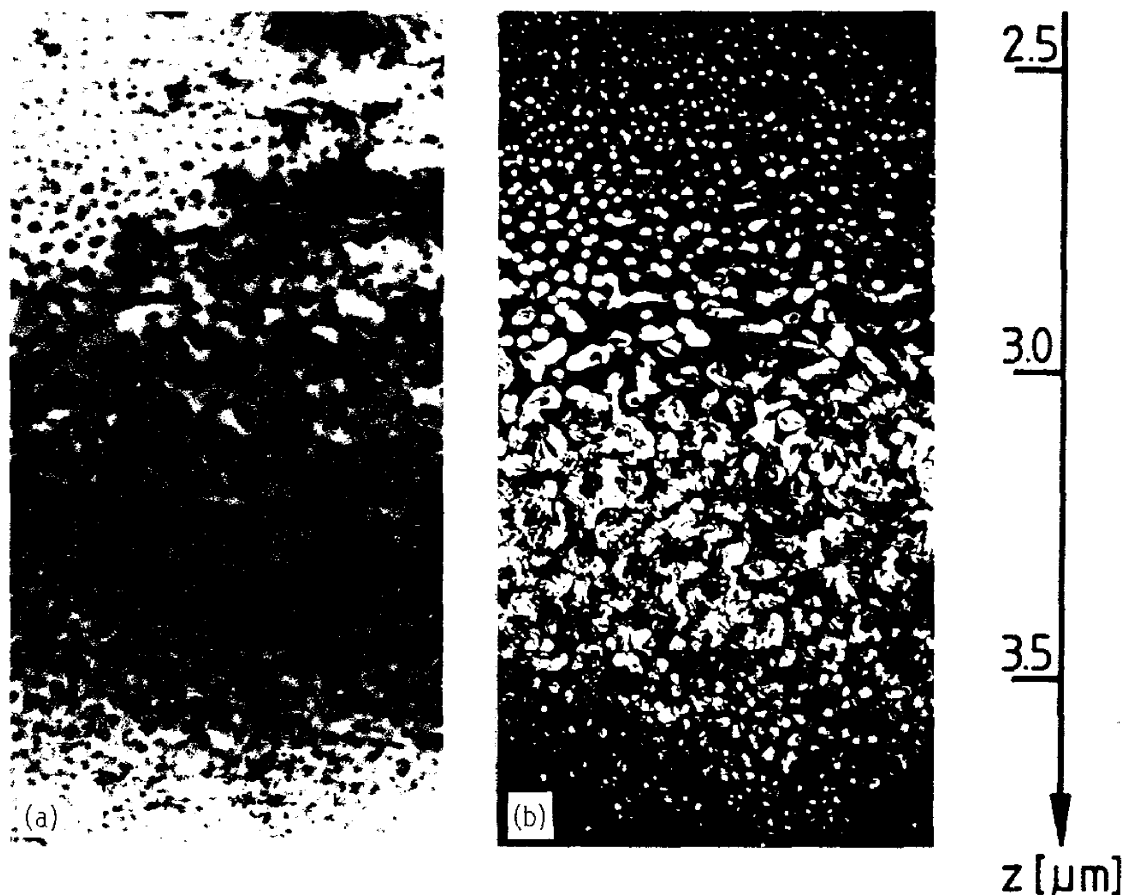


Abb. 6.28

XTEM-Aufnahmen für den Bereich des NiSi_2 -Konzentrationsmaximums bei einer Dosis von $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). (a) Hellfeld; (b) (200)-Dunkelfeld für die Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungsverteilung. Oberflächennormale und Probenorientierung $\sim \parallel [01\bar{1}]$.

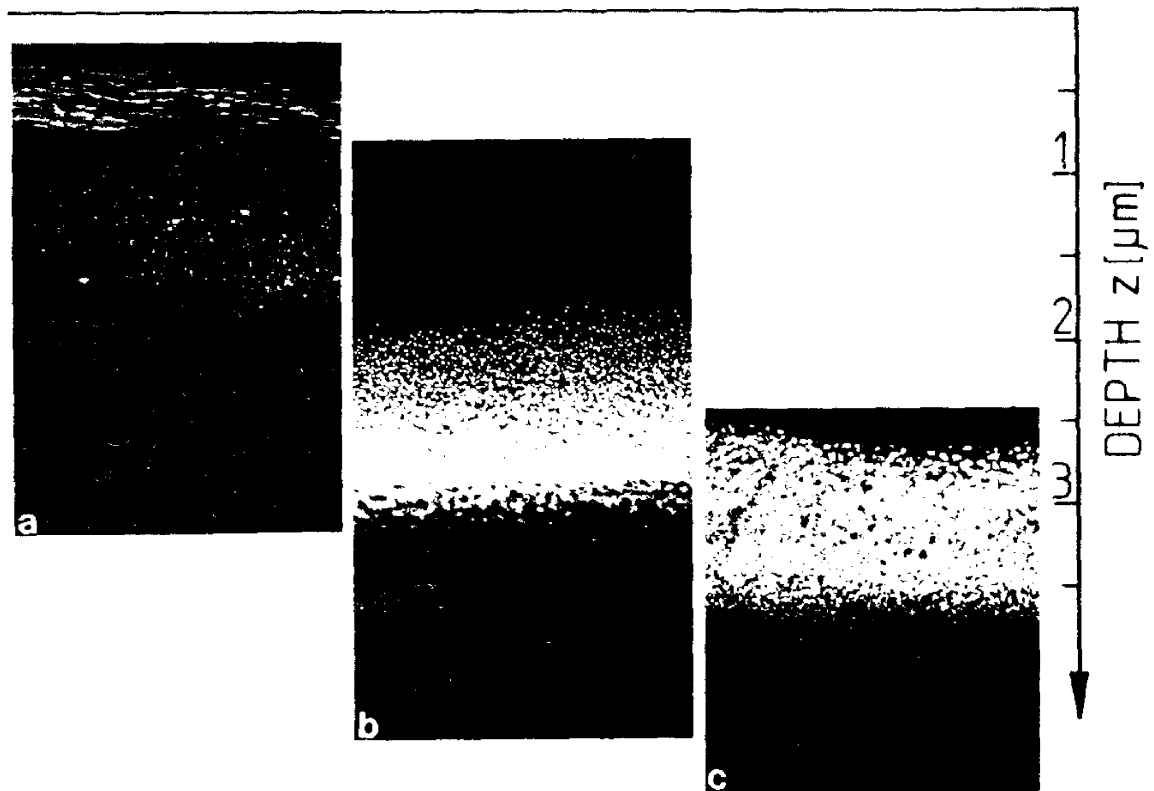


Abb. 6.29

XTEM (200)-Dunkelfeldabbildungen für eine Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). Oberflächennormale $\parallel [11\bar{2}]$, Probenorientierung $\parallel [02\bar{3}]$. Die hier gezeigte Probe wurde soweit gedünnt, daß an einigen Stellen der Oberflächenbereich bis in verschiedene Tiefen vollständig abgetragen ist. Um der in z-Richtung zunehmenden Probendicke Rechnung zu tragen, werden überlappende Abschnitte des Tiefenprofils an Hand von drei verschiedenen durchstrahlbaren Bereichen (a-c) dargestellt. Aufgrund von Absorption erscheint in (a) und (b) der Bereich maximaler NiSi_2 -Konzentration teilweise schwarz.

Abb. 6.29 zeigt für eine Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ (200)-XTEM-Dunkelfeldaufnahmen der Tiefenverteilung von Typ-A NiSi_2 , das sich nun in Tiefen zwischen ~ 1.0 und $4.0 \mu\text{m}$ beobachten läßt. Die kleinsten NiSi_2 -Teilchen haben dabei Durchmesser von etwa 30 \AA . Relativ starke Änderungen der NiSi_2 -Konzentration findet man in Tiefen von etwa 2.0 , 2.6 und $3.7 \mu\text{m}$. Zwischen $z \approx 1.8 \mu\text{m}$ und $z \approx 2.2 \mu\text{m}$ wächst der typische Ausscheidungsdialogmesser von ~ 80 auf $\sim 120 \text{ \AA}$ an, in

2.6 - 2.7 μm Tiefe findet man erste zusammengewachsene Kristallite ($\varnothing \sim 400 - 600 \text{ \AA}$). Diese polyedrischen Ausscheidungen bilden, ebenso wie die Teilchen im Bereich der hinteren Profilflanke (vgl. Abb. 6.30), bevorzugt $\{111\}$ -Grenzflächen zur Siliziummatrix aus. Die größten isoliert zu beobachtenden Ausscheidungen mit Durchmessern bis zu $\sim 1000 \text{ \AA}$ liegen in einer Tiefe von ca. 2.8 μm vor und sind nur noch durch schmale Säume kristallinen Siliziums getrennt.

Das NiSi_2 -Konzentrationsmaximum wird für diese Dosis bei etwa 3.0 - 3.1 μm erreicht. Da es keinen Beugungsreflex gibt, mit dem allein Silizium, nicht jedoch auch NiSi_2 angeregt wird, kann nur durch Kippexperimente beurteilt werden, ob im Bereich des Maximums eine geschlossene NiSi_2 -Schicht vorliegt.

Abb. 6.30 zeigt eine Dunkelfeldkippserie für den Bereich des Profilmaximums, aufgenommen an einem Ausschnitt der bereits in Abb. 6.29 dargestellten cross-section-Probe. In der vorliegenden $(02\bar{3})$ -Orientierung

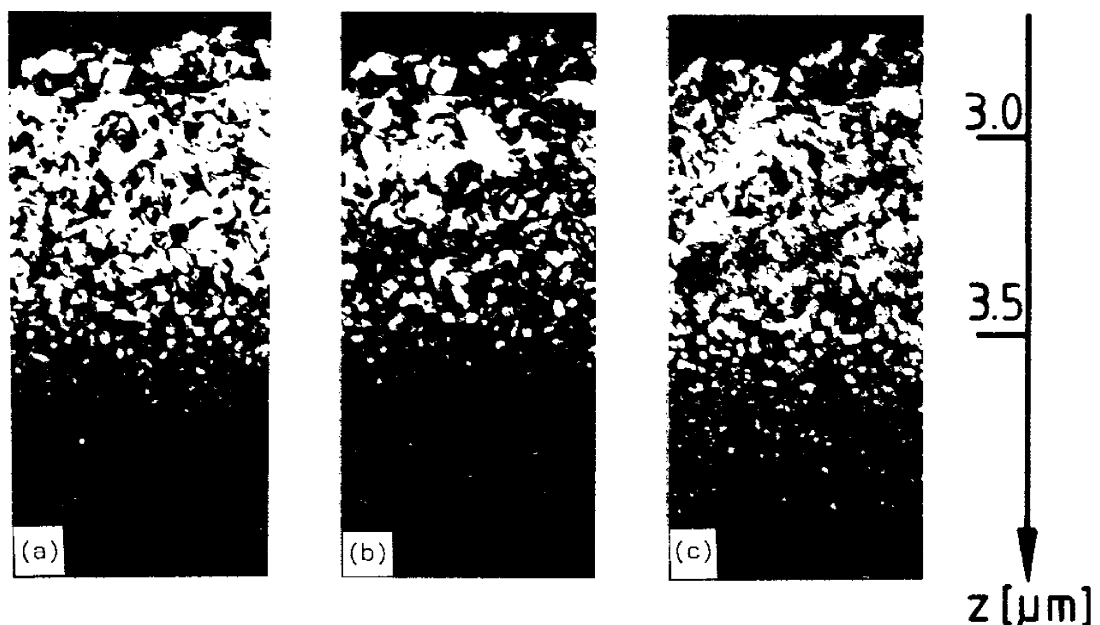


Abb. 6.30

Kippserie von XTEM-(200)-Dunkelfeldabbildungen für den Bereich des Maximums und der hinteren Flanke des NiSi_2 -Konzentrationsprofils der in Abb. 6.29 gezeigten Probe ($D = 1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$). Die Probe ist hier soweit gedünnt, daß der vordere Profilteil fehlt. Die Probenorientierung ist $\sim \parallel [02\bar{3}]$ in (b), in (a) und (c) ist die Probe um $\pm 0.3^\circ$ gegenüber der Orientierung in (b) verkippt. Die im Bereich des Profilausläufers vorliegenden Ausscheidungen weisen bevorzugt $\{111\}$ -Grenzflächen auf.

ist eine Umwegenregung des verwendeten (200)-Reflexes durch (111)-Reflexe ausgeschlossen. Defektfreies Typ-A NiSi_2 würde unter diesen Abbildungsbedingungen hell erscheinen. Bereits geringfügiges Verkippen der Probe um 0.3° führt zu erheblichen Veränderungen der vorliegenden Kontraste. Durch weiteres Kippen der Probe lassen sich sukzessive alle Bereiche im kinematischen (200)-Dunkelfeld hell anregen, was schließen läßt, daß die Kontraste durch Defekte und nicht durch Siliziumeinschlüsse hervorgerufen werden.

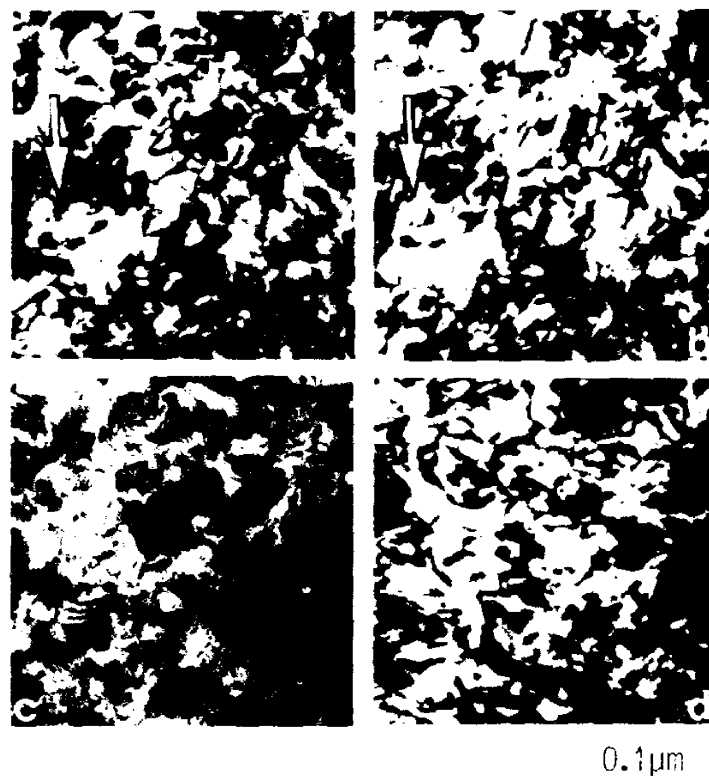


Abb. 6.31

Plane-view TEM-Aufnahmen für das Profilmaximum ($D = 1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$). (a) Dunkelfeld mit dem (002)- NiSi_2 -Reflex, Probenorientierung $\sim \parallel [110]$. (b) wie (a), jedoch um 0.5° gekippt. Das zu beobachtende Verschwinden dunkler Bereiche ist exemplarisch durch Pfeile in (a) und (b) gekennzeichnet. (c) Hellfeldabbildung zu (a). (d) Dunkelfeldabbildung mit dem für Si und NiSi_2 erlaubten ($\bar{1}11$)-Reflex, Probenkipfung 7° gegenüber (a). Die hohe Defektdichte führt zu ähnlichen Kontrasten wie bei Verwendung eines allein für NiSi_2 erlaubten Reflexes in (a) und (b).

Eine weitere Kippserie für den Bereich maximaler NiSi_2 -Konzentration, untersucht an einer in plane-view Technik präparierten Probe, ist in Abb. 6.31 dargestellt. Auch in der Aufsicht läßt sich eine gleichmäßige Anregung des gesamten Ausschnitts im (002)-Dunkelfeld nicht erreichen, und kleine Kippwinkeländerungen beeinflussen deutlich den Kontrast (Abb. 6.31 a und b). Die hohe Dichte an Gitterstörungen zeigt sich ebenfalls im Hellfeld (Abb. 6.31 c) sowie in Dunkelfeldabbildungen unter Verwendung von Reflexen, die für Silizium und NiSi_2 erlaubt sind (Abb. 6.31 d). Die große Defektdichte verhindert weitgehend eine Analyse einzelner Defekte.

Es läßt sich allerdings zeigen, daß im Bereich des NiSi_2 -Konzentrationsmaximums eine geringe Dichte an NiSi_2 -Zwillingen vorliegt (Abb. 6.32 b). Diese kommen hauptsächlich als Plättchen vor. Die Beobachtbarkeit von Ausscheidungsplättchen in einer Typ-A NiSi_2 -Umgebung zeigt, daß diese Plättchen Typ-B Orientierung besitzen.

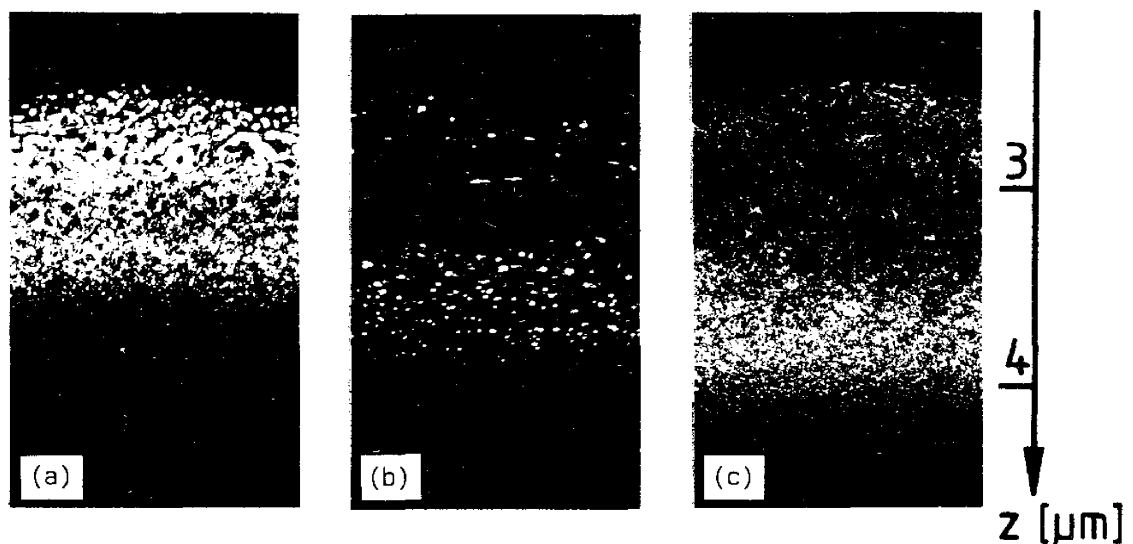


Abb. 6.32

XTEM-Dunkelfeldaufnahmen für die Tiefenzone nahe dem Profilmaximum für eine Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). (a) Typ-A NiSi_2 , Probenorientierung $[01\bar{1}]$, $\vec{g} = (200)$; (b) Typ-B NiSi_2 , Probenorientierung $\parallel [01\bar{1}]$, Abbildungsbedingungen wie in Abb. 6.22 (d); (c) Defektstruktur, Probenorientierung $\parallel [11\bar{2}]$, $\vec{g} = (111)$.

Ähnlich wie bei kleineren Dosen existieren polyedrische Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen vornehmlich in den Ausläufern des NiSi_2 -Konzentrationsprofils (Abb. 6.32 b). Die vordere Schicht hoher Dichte an plättchenförmigen Ausscheidungen parallel zu (111) erstreckt sich bei dieser Dosis von der Oberfläche bis in etwa $0.7 \mu\text{m}$ Tiefe (Abb. 6.29 a). In der [111]-Aufsichtsperspektive (Abb. 6.33 a) ist der Tiefenbereich hoher Plättchendichte durch das Auftreten von versetzungsartigen Kontrasten in Form großer Ringe ($\varnothing \sim 6500 \text{ \AA}$) sowie durch Zusatzreflexe im Beugungsbild (Abb. 6.33 b) gekennzeichnet. Diese ergeben sich an den Schnittpunkten von [111]-streaks mit der Ewald-Kugel und lassen sich beim Kippen der Probe über Winkelbereiche von 45° verfolgen.

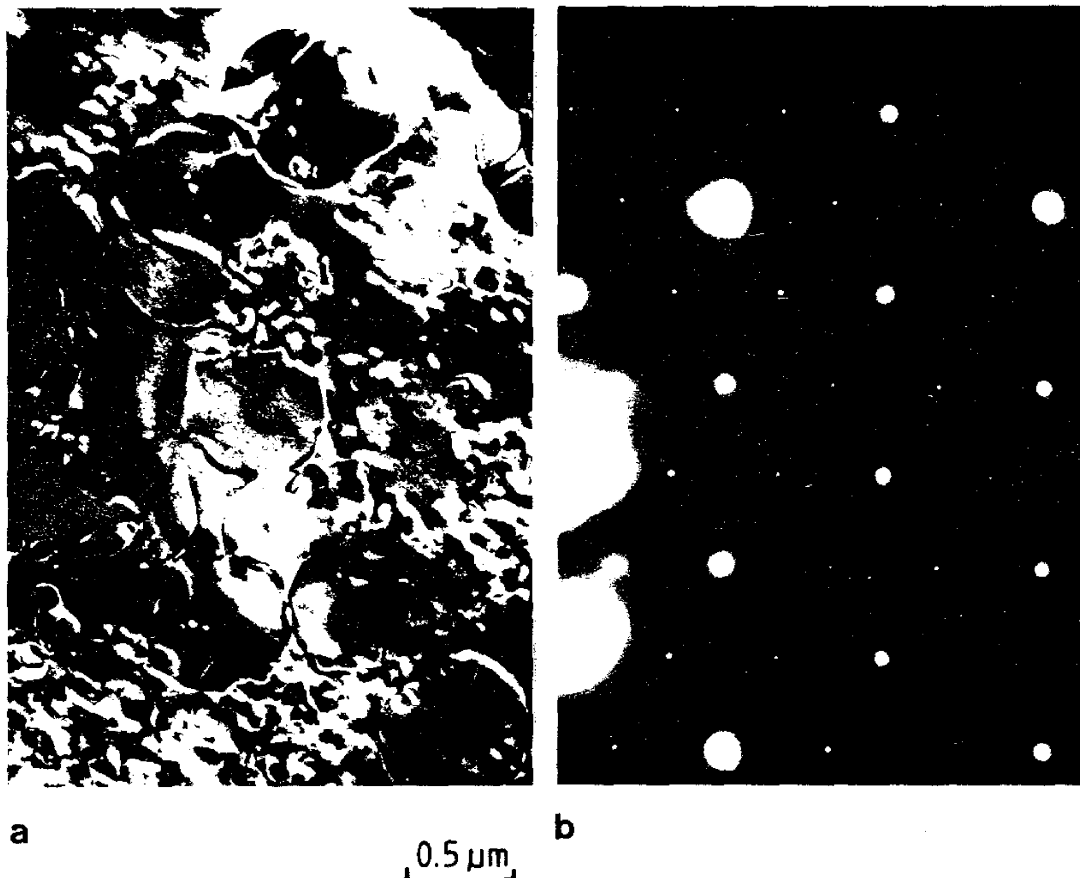


Abb. 6.33

(a) Plane-view ($\bar{2}02$)-Dunkelfeldaufnahme im Bereich hoher Plättchendichte bei $z \approx 0.6 \mu\text{m}$ ($D = 1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$) und zugehöriges [111]-Beugungsbild (b). Die (schwachen) Zusatzreflexe treten zusammen mit den in (a) zu erkennenden großen Ringen auf.

Die in diesem Abschnitt betrachteten Ausscheidungsverteilungen für Dosen zwischen 3×10^{17} und 1.3×10^{18} Ni/cm² zeigen folgende gemeinsame Merkmale:

1. Es wird ausschließlich die NiSi₂-Phase beobachtet.
2. Die größten polyedrischen Ausscheidungen mit Typ-A und Typ-B Orientierung befinden sich in einer Zone bei etwa 2.8 – 3.1 µm.
3. Die höchste Dichte an NiSi₂ wird in Tiefen von 3.0 – 3.2 µm festgestellt.
4. Der größte Anteil an NiSi₂ liegt in Form polyedrischer Präzipitate mit Typ-A Orientierung vor.
5. Hohe Dichten plättchenförmiger und polyedrischer Typ-B NiSi₂-Ausscheidungen treten hauptsächlich in den Flanken der NiSi₂-Verteilung auf.

Diese Ergebnisse werden im folgenden diskutiert.

Nickelsilizidbildung

Die Bildung von NiSi₂ durch Ni-Hochdosisimplantation bei 450 K wurde bereits in Kap. 6.2.8 hinsichtlich der bei "konventioneller" Herstellung notwendigen Bildungstemperaturen diskutiert. An dieser Stelle sollen Ergebnisse anderer Arbeiten betrachtet werden, die sich mit dem Vorliegen von Siliziden im Zustand nach Ni-Implantationen befassen. Bei anderen Implantationsbedingungen wird z.T. außer NiSi₂ auch NiSi beobachtet.

Petukhov et al. /214/ implantieren Ni-Ionen mit einer Energie von 40 keV im Dosisbereich zwischen 1.8 und 9.0×10^{17} Ni/cm² bei Temperaturen von 420 und 670 K. Mit Elektronen- und Röntgenbeugung finden sie polykristallines NiSi₂ im Bereich "nahe der Oberfläche". Durch Kurzzeittempern von Raumtemperaturimplantaten ($D = 2.5 \times 10^{17}$ Ni/cm²) bei Temperaturen ab 750° C kann die Bildung einer epitaktischen NiSi₂-Schicht auf (111)-Si erreicht werden /215/. Die NiSi₂-Schicht ist mit einer dünnen amorphen Schicht bedeckt, die vermutlich aus Siliziumoxid besteht.

Campisi et al. /21/ untersuchen 170 keV Ni-Implantate ($T_i < 70^\circ \text{C}$, $D = 5 \times 10^{15} - 1.8 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$) u.a. mit Hilfe von XTEM und RBS. Es wird angenommen, daß bei einer Dosis von $1.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ innerhalb einer amorphen Schicht Silizium oder NiSi_2 kristallisiert ist. Nach 30 minütigem Tempern bei 900°C finden die Autoren NiSi_2 -Plättchen auf $\{111\}$ -Ebenen sowie NiSi an der Oberfläche der (100)-orientierten Proben. Zur Erklärung der hohen Ni-Konzentration an der Oberfläche wird der "Schneepflugeffekt" in Betracht gezogen, der durch die sich beim Tempern verschiebende amorph/kristalline Grenzschicht bewirkt wird. Bei Dosen von $6 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ befindet sich das Maximum des Ni-Konzentrationsprofils bereits im Zustand nach der Implantation an der Oberfläche.

Sanchez et al. /20/ beobachten nach 100 keV Ni-Implantationen in (100)-Si bei Raumtemperatur für Dosen bis $6 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ keine Silizidbildung. Durch Sputtern hat sich das Ionenprofilmaximum bei der höchsten Dosis um mehr als 600 Å zur Oberfläche verlagert und befindet sich in einer Tiefe von $\sim 200 \text{ Å}$. Tempern bei 400°C (30 min.) führt zur Bildung von NiSi_2 , das allerdings nicht homogen zu sein scheint /20/. Nach 150 keV Ni-Ionenbeschuß bei 350°C ($D = 8 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$) wird NiSi zusammen mit polykristallinem Silizium durch Röntgenbeugung und RBS identifiziert.

In allen Fällen werden so kleine Energien verwendet, daß das Ni-Konzentrationsprofil drastisch durch die Verlagerung der Probenoberfläche durch Sputtererosion beeinträchtigt ist. Die Silizidbildung findet an der Probenoberfläche statt, so daß diese — anders als in den hier vorgestellten Untersuchungen — das Resultat beeinflussen kann.

Zone grober Ausscheidungsstruktur

Die bei allen Proben mit Dosen ab $3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ zu beobachtende Zone großer Ausscheidungen befindet sich etwa in der Tiefe, in der bei der kleineren Dosis von $2 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ die maximale NiSi_2 -Konzentration und — abgesehen von den Ausscheidungen in der dünnen amorphen Schicht — die größten NiSi_2 -Präzipitate beobachtet werden ($z = 3.0 \mu\text{m}$, Kap. 6.2.8). Das auffällige Fehlen kleiner Präzipitate ($\varnothing \leq 100 \text{ Å}$) in dieser Zone bei Dosen ab $3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ läßt sich damit erklären, daß die bei kleineren Dosen bereits vorliegenden Teilchen lokale Senken für die bei weiterer Bestrahlung zugeführten Ni-Atome darstellen, was

in einer Vergrößerung der Ausscheidungsstruktur resultiert. Ein zur Vergrößerung einer Ausscheidungsverteilung führender Mechanismus wird in Kap. 6.3 in Zusammenhang mit den dort beschriebenen Temperexperimenten näher erläutert.

Tiefe maximaler NiSi_2 -Konzentration

Die Tiefe maximaler NiSi_2 -Konzentration z_{max} ist offenbar dosisabhängig. Darauf deutet auch die Verlagerung des Maximums der optischen Reflektivitätsänderung hin, das sich bei hohen Dosen aufgrund seiner Wellenlängenabhängigkeit als NiSi_2 -Konzentrationsmaximum ansehen läßt (Kap. 6.2.7). Entsprechende Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung von Hochdosisproben sind in Abb. 6.34 dargestellt. Bei der höchsten Dosis ist ein rückläufiges Verhalten der Reflektivitätsänderung festzustellen, das wahrscheinlich mit dem Zusammenwachsen der Ausscheidungen zu einer geschlossenen Schicht in Verbindung steht.

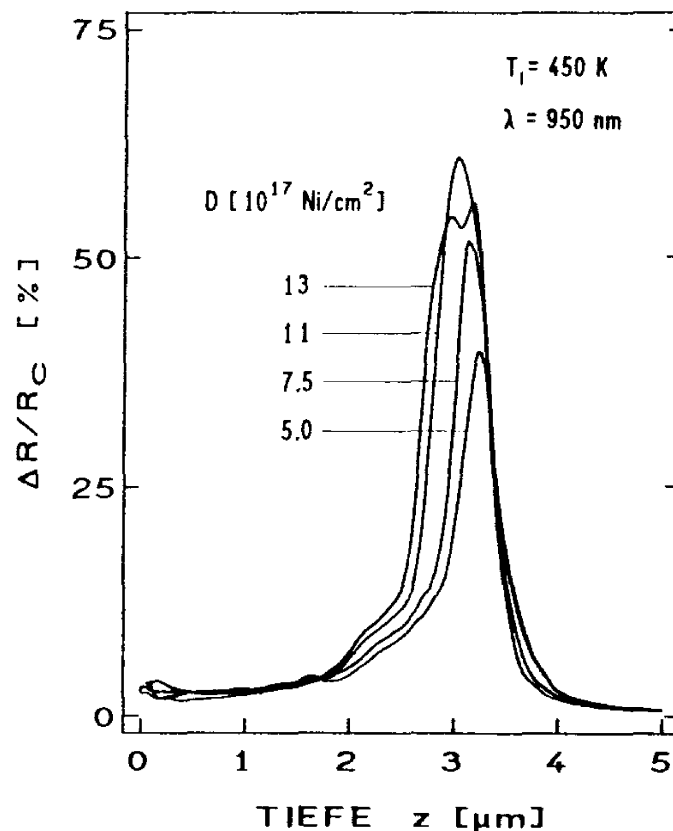


Abb. 6.34

Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung $\Delta R/R_c$ bei 950 nm nach Hochdosis-Ni-Implantation in Silizium bei 450 K.

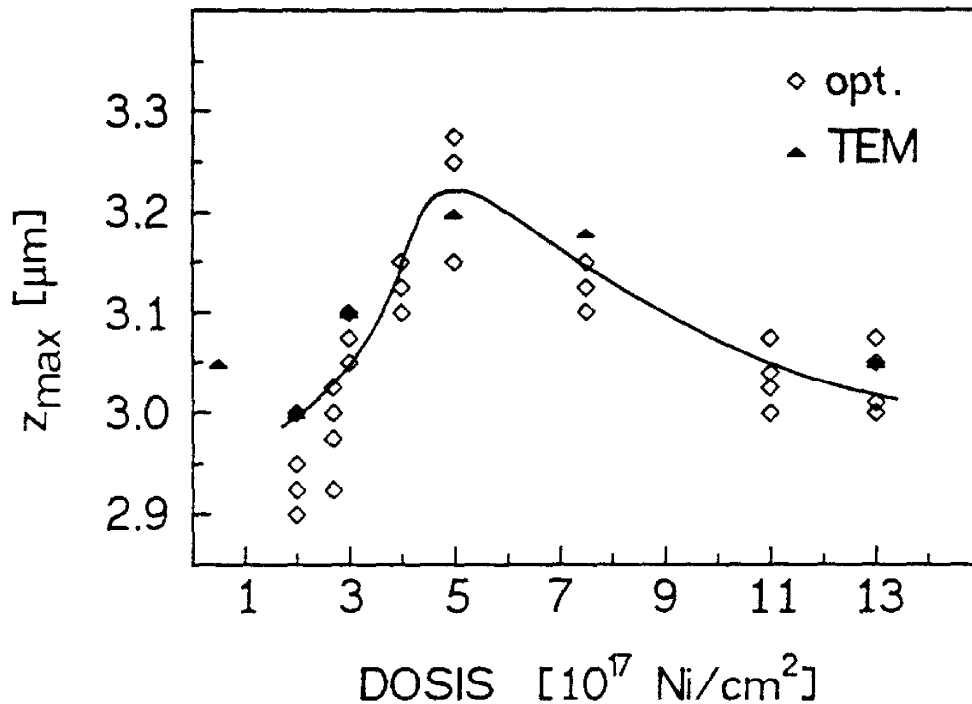


Abb. 6.35

Elektronenmikroskopisch bzw. optisch bestimmte Tiefen maximaler NiSi_2 -Konzentration nach 6 MeV ^{58}Ni -Implantation in Silizium bei 450 K als Funktion der Dosis. Die eingetragenen Werte repräsentieren Messungen an unterschiedlichen Proben und/oder bei verschiedenen Wellenlängen. Die Kurve beschreibt die Mittelwerte aller Messungen.

In Abb. 6.35 sind die optisch und elektronenmikroskopisch bestimmten Tiefen z_{\max} in Abhängigkeit von der Dosis dargestellt. Im Dosisintervall zwischen 2 und 5×10^{17} Ni/cm 2 verschiebt sich das Maximum der NiSi_2 -Konzentration von $z = 3.0$ μm zu größeren Tiefen und bei weiterer Dosissteigerung wieder zurück. Es ist wichtig anzumerken, daß die beobachteten Verlagerungen wegen der Größe der Meßfehler nur aus den Mittelwerten gefolgert werden können.

Das Auftreten maximaler NiSi_2 -Konzentration bei $z = 3.0$ μm nach Bestrahlung mit 2×10^{17} Ni-Ionen/cm 2 bei 450 K anstatt bei 3.3 μm wie bei tiefen Temperaturen wurde in Kap. 6.2.8 durch Getterprozesse erklärt. Die Verschiebung von z_{\max} von 3.0 μm in eine Tiefe von etwa 3.25 μm im Dosisintervall $2 - 5 \times 10^{17}$ Ni/cm 2 deutet darauf hin, daß

die zuerst in $3.0\text{ }\mu\text{m}$ Tiefe gebildeten Senken abgesättigt werden oder entsprechende bzw. neue Senken auch in größeren Tiefen auftreten. Auf ein Sättigungsverhalten der Getterwirkung von Strahlenschäden auf Nickel weisen auch Buck et al. /210/ hin. Die mit zunehmender Dosis auch in Tiefen $z \gtrsim 3.0\text{ }\mu\text{m}$ wachsenden Ausscheidungen stellen im Sinne der obigen Diskussion zusätzliche Senken für die nachfolgend eingebrachten Ni-Atome dar und hemmen die Diffusion von Ni-Atomen aus der Tiefe des Reichweitemaximums ($3.3\text{ }\mu\text{m}$) in die Zone größerer Ausscheidungsstruktur.

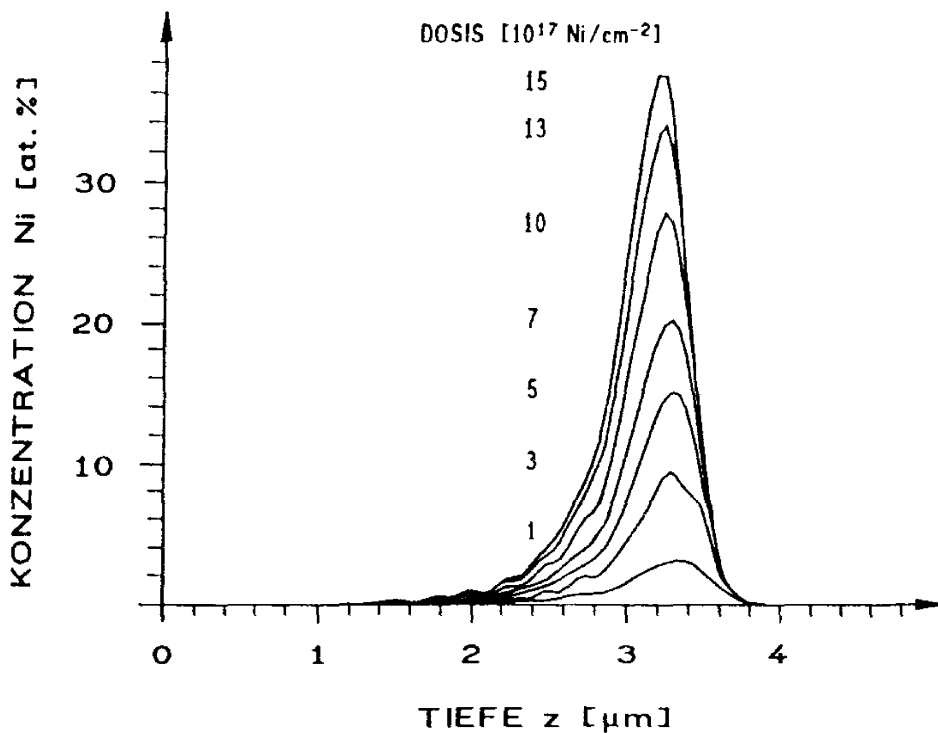


Abb. 6.36

Tiefenprofile der Ni-Konzentration nach $6\text{ MeV }^{58}\text{Ni}$ -Implantation in Silizium, berechnet mit dem Programm HIDOS /48-50/ für verschiedene Dosen.

Ein Prozeß, der zu der bei Dosen oberhalb $5 \times 10^{17}\text{ Ni/cm}^2$ festzustellenden Abnahme von z_{max} (Abb. 6.35) beiträgt, ist die Verkürzung der Ionenreichweite aufgrund der mit steigender Dosis zunehmenden Dichte des Targets. Die Dichtezunahme ergibt sich sowohl dann, wenn Nickel als Zwischengitteratom in eine starre Siliziummatrix eingebaut wird, als auch dadurch, daß es zur Bildung von NiSi_2 -Ausscheidungen verbraucht wird, denn die Dichte

an Siliziumatomen ist für NiSi_2 und reines Silizium nahezu identisch (Kap. 3.3). Um den Einfluß der Dichtezunahme auf das Ni-Konzentrationsprofil zu berechnen, wurden dynamische Monte-Carlo-Simulationen der Abbremsung von 6 MeV ^{58}Ni -Ionen in Silizium für Dosen bis zu $1.5 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ mit dem Programm HIDOS (Kap. 2.2) durchgeführt (Abb. 6.36). Unter Vernachlässigung anderer möglicher dosisabhängiger Effekte erhält man für eine Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ eine Verringerung von R_{max} um $0.12 \mu\text{m}$ gegenüber einem ohne Berücksichtigung der Dichtezunahme berechneten Profil. Parallel verringert sich die Halbwertsbreite des Ionenprofils von $0.57 \mu\text{m}$ auf $0.41 \mu\text{m}$, so daß die zum Erreichen der NiSi_2 -Stöchiometrie notwendige Dosis von $1.6 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ auf $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ sinkt.

Tiefenverteilung von Typ-A und Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen

Die Tiefenverteilung epitaktischer NiSi_2 -Ausscheidungen mit Typ-A und Typ-B Orientierung zeigt bei den hier betrachteten Dosen auffällige Unterschiede. Es werden hauptsächlich Ausscheidungen mit Typ-A Orientierung gebildet, die bei hinreichend hohen Dosen im Tiefenbereich maximaler Konzentration zu einer vergrabenen, geschlossenen NiSi_2 -Schicht zusammenwachsen. Typ-B Orientierung tritt bevorzugt in den Flanken des NiSi_2 -Profils, d.h. in Gebieten kleinerer Ni-Konzentration auf. Hierin liegt offenbar eine Analogie zu den Beobachtungen von Tung et al. /123/. Diese finden in ihren Untersuchungen an ultradünnen Filmen (Kap. 3.3) epitaktische NiSi_2 -„templates“ mit reiner Typ-B Orientierung gerade dann, wenn eine besonders geringe Menge an Nickel ($1 - 7 \text{ \AA}$) unter UHV-Bedingungen auf atomar saubere (111)-Siliziumoberflächen aufgebracht wird, während bei größeren Nickelmengen ($16 - 20 \text{ \AA}$) ausschließlich Typ-A NiSi_2 entsteht. Bei Nickelfilmen größerer Dicke ergeben sich schließlich doppelpositionierte Schichten.

Um das Vorliegen einer Analogie zu den Beobachtungen von Tung et al. näher zu untersuchen, wurde das Orientierungsverhalten der Ausscheidungen auch bei kleineren Dosen ($2 \text{ und } 5 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$, $T_f = 450 \text{ K}$) genauer analysiert.

Für die Dosis von $5 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ wurde bereits in Kap. 6.2.8 gezeigt, daß kleine Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen im Bereich des Profilmaximums existieren (Abb. 6.21). In den zugehörigen Beugungsbildern läßt sich keine

Intensität an den Stellen erkennen, wo dies für Typ-B NiSi_2 Polyeder oder Plättchen auf $\{111\}$ -Ebenen zu erwarten wäre. Erzeugt man dennoch Dunkelfeldanregungsbedingungen, wie sie zur Abbildung von Typ-B NiSi_2 und NiSi_2 -Plättchen auf der $\{111\}$ -Ebene parallel zur Probenoberfläche notwendig sind, so findet man entsprechende Präzipitate (Abb. 6.37). Demnach gibt es bei der vorliegenden Dosis *eine* Tiefenzone, in der neben Typ-A NiSi_2 auch Typ-B NiSi_2 in Form polyedrischer und plättchenförmiger Ausscheidungen vorkommt.

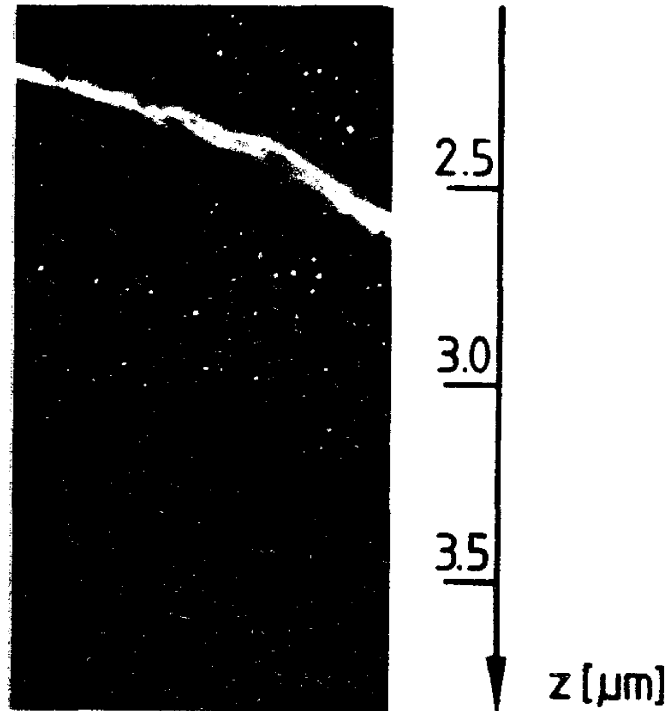


Abb. 6.37

XTEM-Dunkelfeldaufnahme von plättchenförmigen und volumenhaften Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen bei einer Dosis von $5 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). Oberflächennormale $\parallel [\bar{1}10]$, $\vec{g} \approx (\bar{2}\bar{2}0)_{[111] \text{ Typ-B } \text{NiSi}_2}$. (Vgl. Abb. 6.21 für Typ-A NiSi_2 bei gleicher Dosis.)

Entsprechende Untersuchungen an verschiedenen Proben mit einer Dosis von $2 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ ergeben hingegen keinen Hinweis auf die Existenz von volumenhaften Typ-A oder Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen. Jedoch lassen sich plättchenförmige Ausscheidungen ($\varnothing \sim 140 - 1000 \text{ Å}$) auf $\{111\}$ -Netzebenen in einem Tiefenintervall zwischen ~ 2.4 und $\sim 3.4 \text{ μm}$ nachweisen (Abb. 6.38).

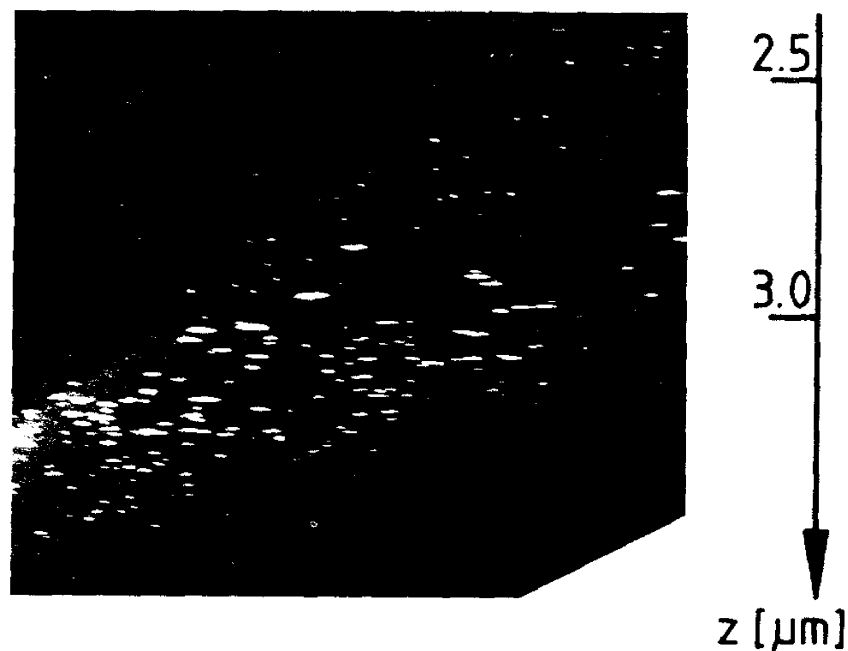


Abb. 6.38

XTEM-Dunkelfeldaufnahme von plättchenförmigen Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen bei einer Dosis von $2 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$). Probennormale $\parallel [22\bar{4}]$, Orientierung $\parallel [01\bar{1}]$, $\vec{g} \approx (1\bar{1}\bar{1})_{[111]}$ Typ-B NiSi_2 .

Die Bildung polyedrischer NiSi_2 -Ausscheidungen mit Typ-A Orientierung sowie verzwillingter NiSi_2 -Plättchen auf $\{111\}$ -Ebenen wird auch in Untersuchungen an mit Nickel verunreinigten Siliziumwafern beobachtet /216/. Weiterhin werden NiSi_2 -Ausscheidungen unterschiedlicher Morphologie in gezielt mit Nickel dotierten Siliziumkristallen gefunden /217,218/. Dabei wird nach Eindiffusion von Nickel in Silizium bei $850 - 1050 \text{ }^\circ\text{C}$ und Abschrecken der Proben auf Raumtemperatur vollständiges Ausscheiden von Nickel in Form von Typ-A orientierten NiSi_2 -Plättchen mit einer Dicke von zwei $\{111\}$ - NiSi_2 -Netzebenen festgestellt /218/. HRTEM-Analysen zeigen, daß diese Plättchen durch Si-Si-Bindungen mit dem Wirtsgitter verbunden sind. Dies bedeutet, daß die Ni-Atome, von denen jedes ein Grenzflächenatom darstellt, wie die Grenzflächenatome von NiSi_2 -Aufdampfschichten auf $\{111\}$ -Silizium 7-fach koordiniert sind (s. Kap. 3.3). Auslagerung bei Temperaturen zwischen 500 und $800 \text{ }^\circ\text{C}$ führt zu einer Orientierungstransformation zu Typ-B. Als Ursache hierfür wird eine Relaxation der Fehlpassungsspannungen angenommen. Die Koordination der Ni-Grenzflächenatome in den Typ-B NiSi_2 -Plättchen wird nicht angegeben.

Die genannten Untersuchungen liefern keine Informationen hinsichtlich der Konzentrations- oder Tiefenabhängigkeit des Orientierungsverhaltens der Ausscheidungen.

Um das in dieser Arbeit festgestellte Ausscheidungsverhalten interpretieren zu können, sind Annahmen bezüglich der Koordination der Ni-Grenzflächenatome der Ausscheidungen notwendig, da mit dem verwendeten Mikroskop keine direkte Gitterabbildung möglich ist.

Läßt man unterschiedliche Koordinationen für Ni-Atome der Präzipitatgrenzflächen zu, so läßt sich das beobachtete Orientierungsverhalten basierend auf einem Modell von Augustus /216/ interpretieren. Da in NiSi_2 die dichteste Flächenbelegung mit Ni-Atomen auf $\{111\}$ -Ebenen vorliegt, nimmt Augustus an, daß NiSi_2 -Keime durch eine Agglomeration von Ni-Atomen auf diesen Ebenen entstehen. Er geht weiter davon aus, daß die Keimbildung für den Orientierungstyp günstiger ist, dessen Grenzflächenenergie geringer ist. Es werden verschiedene Keimgeometrien betrachtet, bei denen zwischen Keim und Siliziummatrix sowohl Si-Si- als auch Ni-Si-Bindungen vorkommen. Er stellt fest, daß die Keimbildung dann mit kleineren Grenzflächenenergien verknüpft ist, wenn die Si-Atome eines Keims wie in einer Typ-B NiSi_2 -Ausscheidung angeordnet sind, so daß demnach die Keimbildung für Typ-B NiSi_2 begünstigt ist.

Die Keimbildung für NiSi_2 kann gefördert werden, wenn die Grenzflächenenergie im Spannungsfeld eines Gitterfehlers reduziert wird. Das bevorzugte Vorkommen kleiner Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen entlang von Versetzungen wurde in Kap. 6.2.8 gezeigt und weist auf eine dort geförderte Bildung der energetisch ungünstigeren Typ-A Keime hin.

Das Wachstum der von Augustus betrachteten Keime führt zu kohärenten Kristalliten, wie sie für beide Orientierungstypen in den $[1\bar{1}0]$ -Projektionen in Abb. 6.39 dargestellt sind. Im Falle des Typ-A orientierten Präzipitats sind die Tetraederbindungen der Siliziummatrix entlang aller Ausscheidungsberandungen ungestört. Bei der Typ-B orientierten Ausscheidung treten außer entlang den (111) -Zwillingsgrenzflächen erhebliche Bindungsdefekte auf. Um bei weiterem Wachstum die in der Berandung gespeicherte

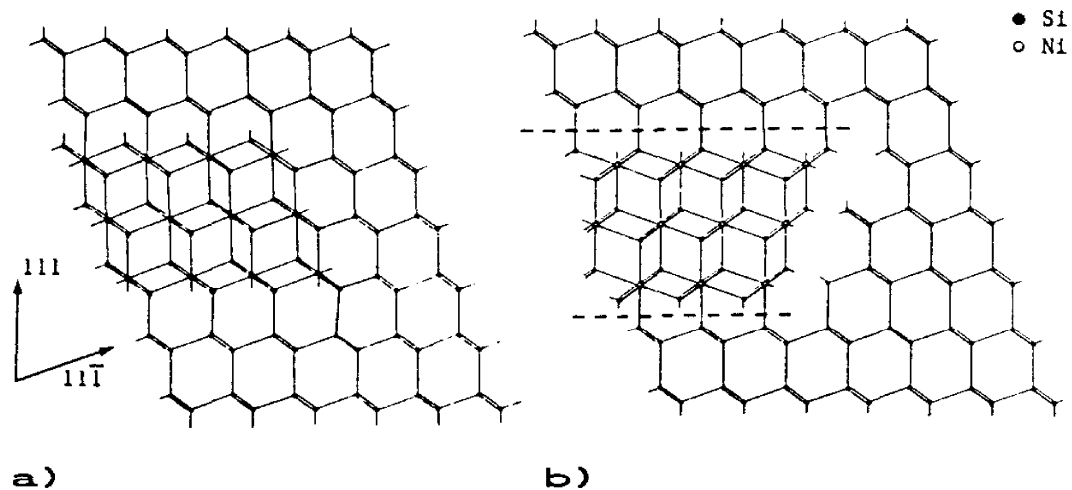


Abb. 6.39

$[1\bar{1}0]$ -Projektionen von Typ-A (a) bzw. Typ-B (b) NiSi_2 -Ausscheidungen nach Augustus /216/. Man beachte die unterschiedliche Struktur an jeweils der oberen und unteren Grenzfläche beider Ausscheidungen. Die Grenzflächen werden sowohl aus Ni-Si- als auch aus Si-Si-Bindungen gebildet.

Grenzflächenenergie gering zu halten, sollte sich die Typ-B NiSi_2 -Ausscheidung vornehmlich in der (111)-Ebene ausdehnen, so daß flache Typ-B NiSi_2 -Plättchen entstehen. Dagegen ist das Wachstum der Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen in keiner Richtung Einschränkungen unterworfen. Hierbei sollten allerdings die als besonders niederenergetisch angesehenen (111)-Grenzflächen gebildet werden, woraus sich oktaedrische Ausscheidungsformen ergeben würden.

Für das weitere Wachstum eines Typ-A NiSi_2 -Kristallits ist es erforderlich, daß jeweils lediglich *ein* Siliziumatom durch ein Nickelatom von seinem Gitterplatz in eine Oktaederlücke des Si-Gitters verlagert wird. Dagegen ist für das Wachstum der Typ-B NiSi_2 -Ausscheidung pro zusätzlichem Ni-Atom die Verlagerung von *einem oder zwei* Si-Atomen notwendig, je nach angenommener Koordination der Ni-Atome in der Grenzfläche. Beim Wachstum in $[111]$ -Richtung um nur eine Si-Ni-Si-(111)-Lage ergibt sich zusätzlich eine merkliche Störung der Tetraederbindungen der Siliziummatrix entlang der (111)-Zwillingsgrenzfläche.

In Probenbereichen kleiner Nickelkonzentration ist wegen der geringen Wahrscheinlichkeit für die Bildung hinreichend großer Ni-Agglomerate mit einer geringen Keimbildungsrate für NiSi_2 -Ausscheidungen zu rechnen. Im Rahmen des beschriebenen Modells wäre daher zu verstehen, daß in solchen Probenbereichen bevorzugt die keimbildungsbegünstigten Typ-B NiSi_2 -Plättchen auftreten, während in Gebieten höherer Ni-Konzentration aufgrund ihres Vorteils beim Wachstum vor allem polyedrische Typ-A NiSi_2 -Präzipitate beobachtet werden.

Wegen der oben erwähnten experimentellen Hinweise darauf, daß $\text{NiSi}_2/(111)\text{-Si}$ -Grenzflächen bevorzugt aus tetraedrischen Si-Si-Bindungen aufgebaut werden (Ni-Grenzflächenatome 7-fach koordiniert), soll die Bildung von NiSi_2 -Ausscheidungen über das Modell von Augustus /216/ hinaus hier auch unter der einschränkenden Annahme betrachtet werden, daß die atomare Anordnung sowohl in den Keimen als auch den Ausscheidungsberandungen der in einer (111)-Grenzfläche mit 7-facher Ni-Koordination entspricht.

Abb. 6.40 (a) und 6.41 (a) zeigen mögliche Keime für Typ-A und Typ-B NiSi_2 auf einer (111)-Si-Netzebene. In beiden Anordnungen ist die dicht gepackte Si-Ni-Si-Reihe hier allein durch Si-Si-Bindungen mit dem Wirtsgitter verbunden. Um dies zu ermöglichen, ist in beiden Fällen ein Abgleiten der Siliziummatrix oberhalb bzw. unterhalb des Keims erforderlich, um $\frac{a}{4} [11\bar{1}]$ im Falle des Typ-A Keims und um $\frac{a}{12} [111]$ für den Typ-B Keim. Das Abgleiten ist durch Doppelpfeile in den Abbildungen gekennzeichnet. Die atomaren Anordnungen in Abb. 6.40 (a) und 6.41 (a) sind zu beiden Seiten der Keime äquivalent zu denen entsprechender $\text{NiSi}_2/(111)\text{-Si}$ -Grenzflächen. Da nach Modellrechnungen von Fujitani und Asano /149/ Typ-B $\text{NiSi}_2/(111)\text{-Si}$ -Grenzflächen energetisch günstiger sind und da weiterhin die Abgleitung des Siliziumgitters im Falle des Typ-B Keims geringer ist, scheint die Bildung eines solchen Typ-B Keims mit einer höheren Wahrscheinlichkeit verbunden zu sein als die des Typ-A Keims.

Für beide Keime ist sicherlich laterales Wachstum günstig. Darüberhinaus kann der Typ-A Keim wiederum auch in $[111]$ -Richtung wachsen, indem pro angelagertem Ni-Atom ein Si-Atom auf einen Oktaederplatz verlagert

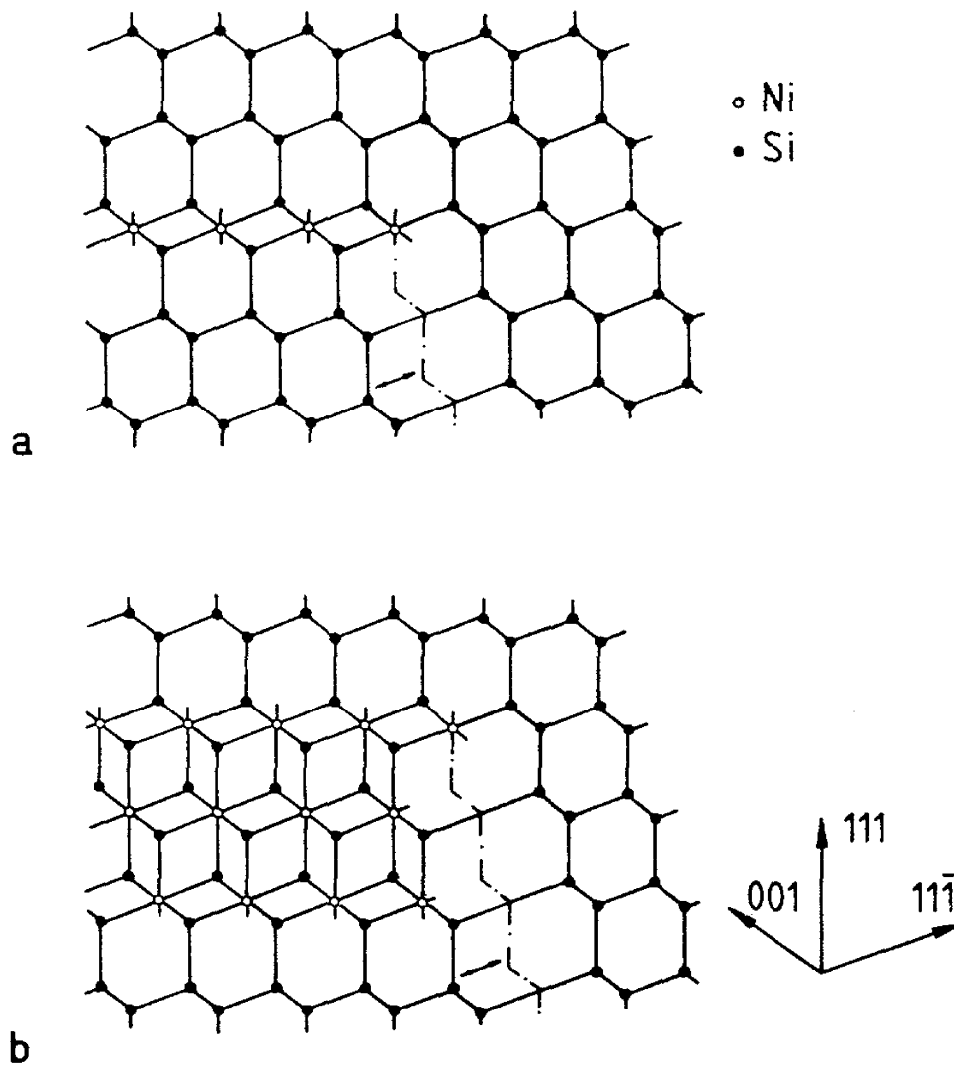


Abb. 6.40

[1 $\bar{1}$ 0]-Projektionen für Keimbildung (a) und Wachstum (b) von Typ-A NiSi_2 unter der Annahme, daß ausschließlich Si-Si-Bindungen in den Grenzflächen vorkommen. Die Relaxation von Bindungsstörungen bleibt hier zur Verdeutlichung des Abgleitens der Siliziummatrix (Doppelpfeile) unberücksichtigt.

wird. Hierbei werden offenbar keine zusätzlichen Bindungsstörungen entlang der sich verschiebenden (111)-Grenzfläche erzeugt. Für ein Kristallwachstum in $[11\bar{1}]$ -Richtung ist lediglich eine Verlagerung der an dieser Grenzfläche vorhandenen Gitterstörungen erforderlich, auch hier werden keine zusätzlichen Bindungsdefekte geschaffen.

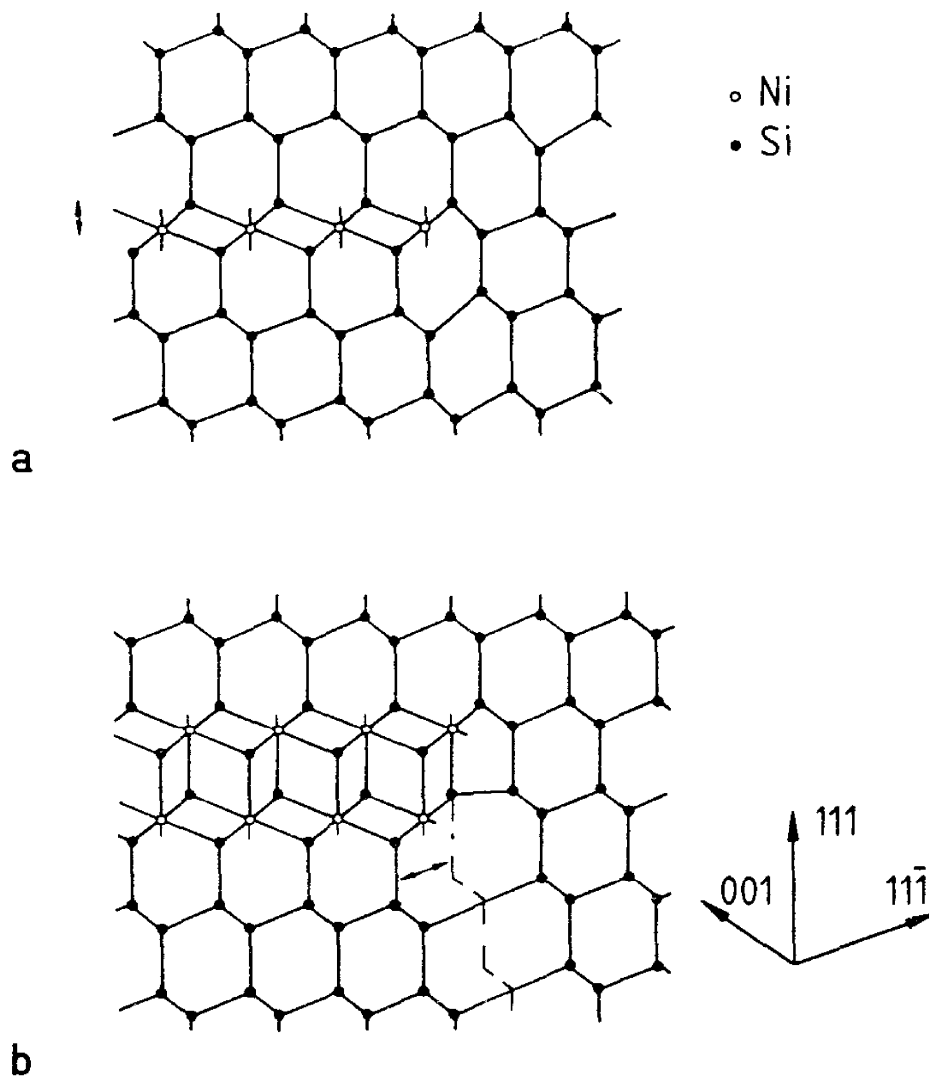


Abb. 6.41

[1 $\bar{1}0$]-Projektionen für Keimbildung (a) und Wachstum (b) von Typ-B NiSi_2 unter der Annahme, daß ausschließlich Si-Si-Bindungen in den Grenzflächen vorkommen. Die Relaxation von Bindungsstörungen in der Siliziumumgebung ist nur zum Teil berücksichtigt.

Dagegen ist wiederum für ein Wachstum des Typ-B Keims pro angelagertem Ni-Atom die Umordnung von zwei Si-Atomen notwendig. Für ein Wachstum in $[111]$ -Richtung um einen (111) -Netzebenenabstand muß zusätzlich ein weiteres Abgleiten des Siliziumgitters oberhalb der Ausscheidung um $\frac{a}{6} [11\bar{2}]$ erfolgen, wenn tetraedrische Si-Si-Bindungen an der Grenzfläche erhalten bleiben sollen. Folglich erscheint ein volumenhaftes Kristallwachstum auch hier im Falle einer Typ-A NiSi_2 -Ausscheidung günstiger.

Insgesamt ergeben somit beide betrachteten Konzepte eine höhere Keimbildungsrate für Typ-B NiSi_2 und ein schnelleres Wachstum von Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen, was ein bevorzugtes Auftreten kleiner Typ-B NiSi_2 -Teilchen in Gebieten geringer Ni-Konzentration bzw. von Typ-A NiSi_2 -Ausscheidungen in Bereichen höheren Ni-Gehalts erklärt. Darüberhinaus wird das Auftreten dünner NiSi_2 -Plättchen mit Typ-B Orientierung verständlich.

Für eine Überprüfung der hier dargestellten Ausscheidungsmodelle sind zusätzliche HRTEM-Untersuchungen an Ausscheidungsgrenzflächen wünschenswert.

6.2.10 Änderung des Ausbreitungswiderstandes

Die Messung von Tiefenprofilen des Ausbreitungswiderstandes wurde wegen der mit den meisten Meßapparaturen erreichbaren geringen Tiefenauflösung bisher bevorzugt zur Bestimmung tiefliegender Diffusionsprofile eingesetzt (z.B. /164,219/). Die hier entwickelte Apparatur erlaubt aufgrund der verwendeten kleinen Meßspitzen und wegen der geringen Auflagekräfte auch die Untersuchung von Implantationsprofilen nach MeV- und keV-Ionenbeschuß /162,163/.

Tiefenprofile des Ausbreitungswiderstandes nach 6 MeV ^{58}Ni -Implantation in Silizium bei 450 K sind in Abb. 6.42 dargestellt. Für eine detaillierte Interpretation solcher Profile sind genaue Kenntnisse über den Einfluß "reiner" Strahlenschäden nach Hochenergieimplantation notwendig, die gegenwärtig erst durch Untersuchungen an 2 MeV Si-Eigenimplantaten gewonnen werden /220/. Daher soll lediglich der Bereich nahe $z \approx 3 \mu\text{m}$ genauer betrachtet werden.

Hier beobachtet man bereits etwa ab einer Dosis von $1 \times 10^{15} \text{ Ni/cm}^2$ eine Absenkung des Widerstandes unter die durch die Meßelektronik bedingte Meßgrenze von $4 \times 10^8 \Omega$. Mit wachsender Dosis entwickelt sich ein breites Minimum, das sich zunehmend zur Oberfläche ausdehnt. Ein solches Verhalten wird auch nach 2 MeV Si-Eigenimplantation festgestellt /220/ und ist daher vermutlich auf elektrisch meßbare Strahlen-

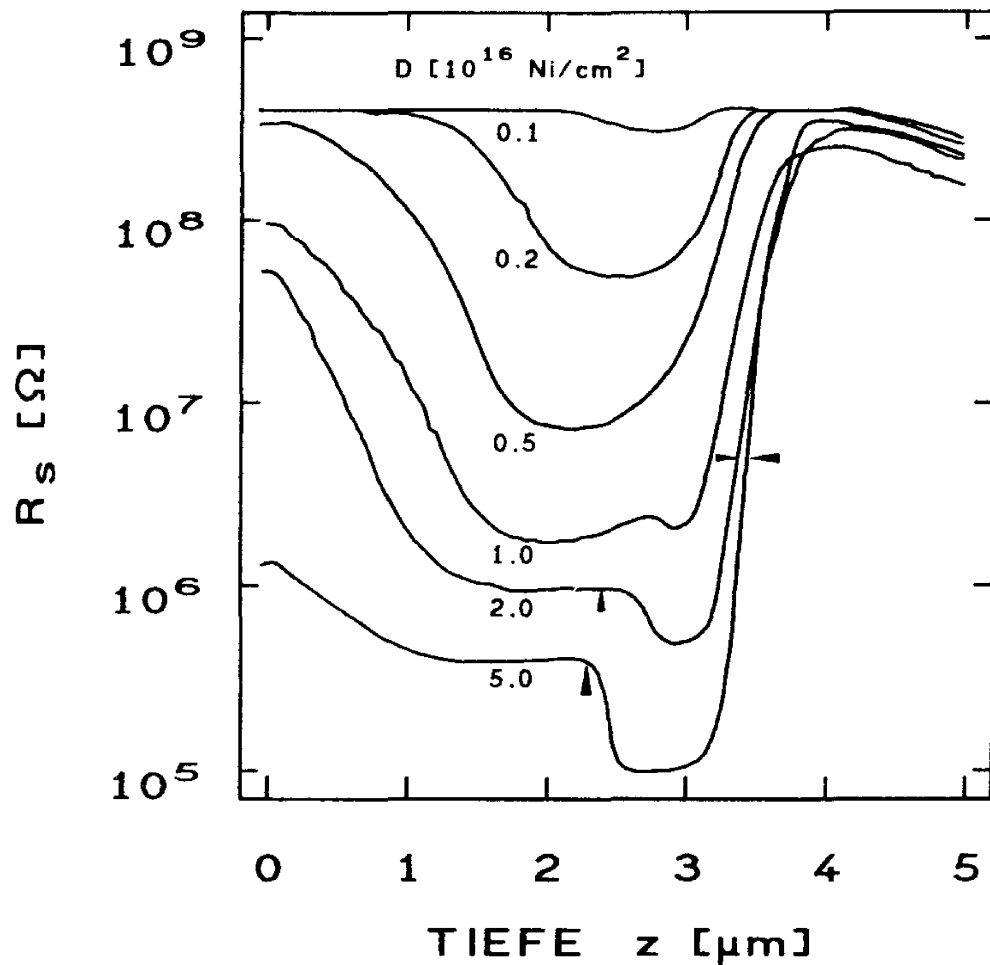


Abb. 6.42

Tiefenprofile des Ausbreitungswiderstandes R_s nach 6 MeV ^{58}Ni -Implantation in Silizium (n-Phosphor, $\rho_0 = 85\text{--}110 \Omega\text{cm}$) bei 450 K für verschiedene Dosen. Die Pfeile markieren Tiefenbereiche, in denen mit TEM NiSi_2 -Ausscheidungen beobachtet werden.

schädigung zurückzuführen. Eine geänderte Verteilung der Substratdotieratome oder einer Änderung ihrer elektrischen Aktivierung sind mögliche Ursachen für die festgestellte Widerstandsverringering.

Bei einer Dosis von $1 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ erkennt man ein zusätzliches Minimum bei $\sim 3.0 \mu\text{m}$, das sich mit zunehmender Dosis stärker ausbildet, während der vordere Teil des Profils immer flacher verläuft. Der Bereich des Minimums ist offenbar korreliert mit Beginn und Ende der Tiefenintervalle, in denen elektronenmikroskopisch NiSi_2 -Präzipitate nachgewiesen

werden können (Markierungen in Abb. 6.42). Demnach ist anzunehmen, daß bereits bei einer Dosis von $1 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^2$ in einer Tiefe von $\sim 3.0 \text{ }\mu\text{m}$ NiSi_2 -Ausscheidungen vorhanden sind.

Untersuchungen nach Hochdosis Ni-Implantation bei 450 K in Siliziumwafer unterschiedlicher Grunddotierung (Phosphor, 85-110 bzw. $\geq 2500 \text{ }\Omega\text{cm}$) ergeben qualitativ gleiche Profilformen. Die Dosisabhängigkeit des Ausbreitungswiderstandes im Bereich des Minimums bei $\sim 3 \text{ }\mu\text{m}$ ist für Siliziumscheiben mit einem spezifischen Ausgangswiderstand $\geq 2500 \text{ }\Omega\text{cm}$ in Abb. 6.43 dargestellt. Die in diesem Bereich mit zunehmender Dosis fortschreitende Bildung von NiSi_2 ist mit einer monotonen Abnahme des Ausbreitungswiderstandes verbunden. Der starke Abfall des Ausbreitungs-

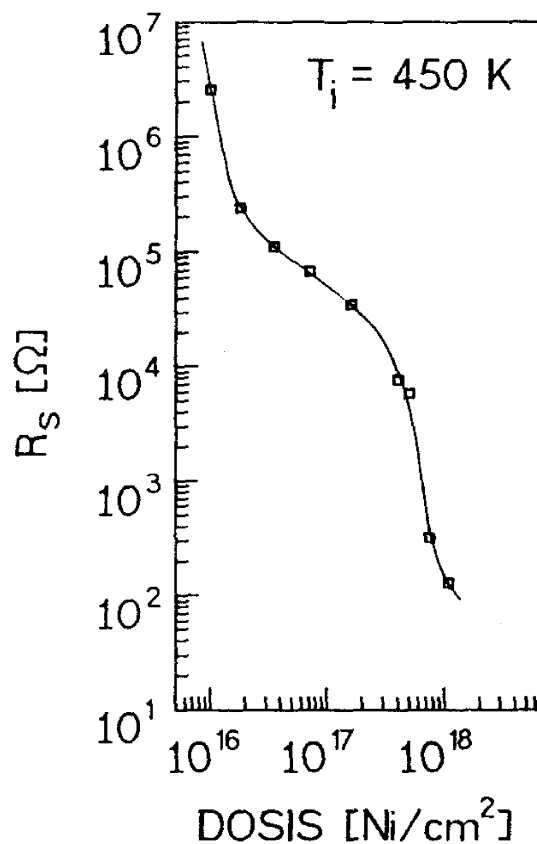


Abb. 6.43

Dosisabhängigkeit des Ausbreitungswiderstandes R_s in der Tiefe des Profilminimums bei $z \approx 3.0 \text{ }\mu\text{m}$ nach 6 MeV ^{58}Ni -Implantation in Silizium (n-Phosphor, $\rho_0 \geq 2500 \text{ }\Omega\text{cm}$) bei 450 K.

widerstandes bei Dosen zwischen 5 und $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ ist offenbar auf das hier einsetzende Zusammenwachsen von NiSi_2 -Ausscheidungen im Maximum ihrer Tiefenverteilung zurückzuführen.

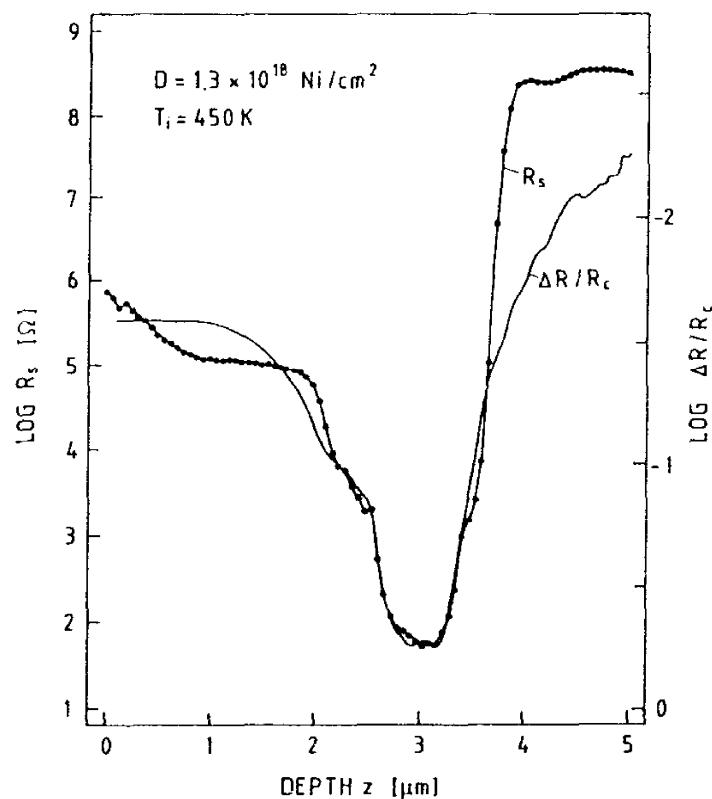


Abb. 6.44

Tiefenprofile des Ausbreitungswiderstandes und der optischen Reflektivitätsänderung bei $\lambda = 980 \text{ nm}$ im Vergleich ($D = 1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$, $\rho_0 = 85-110 \Omega\text{cm}$). Man beachte die unterschiedlichen logarithmischen Skalen.

Für eine Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ erhält man entsprechend der breiten Verteilung von polyedrischen NiSi_2 -Ausscheidungen ein breites Widerstandsprofil mit einem Minimum bei $z \approx 3.0 - 3.1 \mu\text{m}$ (Abb. 6.44). Die Form des Minimums entspricht bei dieser hohen Dosis in etwa der des Maximums im zugehörigen Tiefenprofil der optischen Reflektivitätsänderung bei 980 nm . Die elektronenmikroskopisch beobachteten Gradienten der NiSi_2 -Dichte bei ~ 2.0 , ~ 2.6 und $\sim 3.7 \mu\text{m}$ spiegeln sich in ausgeprägten Flanken in beiden Profilen wider. Die Bildung von NiSi_2 führt bei

dieser Dosis in einer Tiefe von $\sim 3.0 \mu\text{m}$ zu einer Verringerung des Ausbreitungswiderstandes um mehr als sechs Größenordnungen gegenüber dem bei ca. $4 \mu\text{m}$ zu messenden Wert.

Dies zeigt, daß sich durch 6 MeV Ni-Implantation in Silizium bei 450 K tief vergrabene, elektrisch gut leitende Schichten herstellen lassen. Um eine diskrete Schichtstruktur mit hochohmiger Siliziumdeckschicht zu erzeugen, wurden die im nachfolgenden Kapitel beschriebenen Temperexperimente durchgeführt.

6.3 Der Zustand nach Temperbehandlung

Es ist bekannt, daß eine Temperbehandlung von Silizium nach Hochdosis-implantation von Stickstoff unter geeigneten Bedingungen zu einem Aufsteilen des Fremdatomprofils führt. Es bildet sich ein Schichtsystem, bestehend aus einer kristallinen Siliziumdeckschicht, einer isolierenden Si_3N_4 -Schicht und dem kristallinen Siliziumsubstrat /5/. Solche Schichtstrukturen können zur Realisierung hochintegrierter elektronischer Schaltungen in der gegenüber dem Substrat isolierten Deckschicht eingesetzt werden.

Es soll im folgenden gezeigt werden, daß durch Tempern auch im Falle der Hochenergie-Hochdosis Nickelimplantation ein merkliches Aufsteilen der Fremdatomverteilung erreicht werden kann. Durch Vergleich mit den in Kap. 6.2 dargestellten Ergebnissen soll darüberhinaus deutlich gemacht werden, wie die Verteilung der nach der Implantation vorliegenden Ausscheidungen das Resultat einer solchen Temperbehandlung beeinflußt.

Abb. 6.45 zeigt Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung bei Wellenlängen von 450 und 950 nm für 450 K-Hochdosisproben nach fünfstündigem Tempern bei 800 °C. Es ist davon auszugehen, daß bei den vorliegenden hohen Dosen und nach einer solchen Temperbehandlung der Beitrag von Strahlenschäden gegenüber dem des deponierten Nickels eine untergeordnete Rolle spielt, so daß nun der gesamte Profilverlauf hauptsächlich durch die Ni-Verteilung bestimmt wird. Mit AES an entsprechenden Proben bestimmte Tiefenprofile der Ni-Konzentration werden zum Vergleich weiter unten gezeigt.

Das Auftreten deutlicher Reflektivitätsänderungen nahe der Oberfläche deutet darauf hin, daß bei Dosen von 5 und $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ ein Teil des implantierten Nickels beim Tempern zur Oberfläche diffundiert ist. Hier lassen sich bereits lichtmikroskopisch Ausscheidungen beobachten.

Für die kleinste Dosis ($5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$) erhält man nahe $z \approx 3.0 \mu\text{m}$ ein schwach ausgeprägtes Maximum, das mit zunehmender Wellenlänge ($\lambda = 405 - 950 \text{ nm}$) ansteigt, während die optischen Untersuchungen für den ungetemperten Zustand ein solches Maximum in einer Tiefe von $\sim 3.25 \mu\text{m}$ zeigen (Abb. 6.34). Das bei $\lambda = 950 \text{ nm}$ gemessene Profil ist für Tiefen $z < 2.9 \mu\text{m}$ geprägt durch Keilinterferenzen, die kennzeichnend sind für eine abrupte Änderung der optischen Konstanten an der vorderen

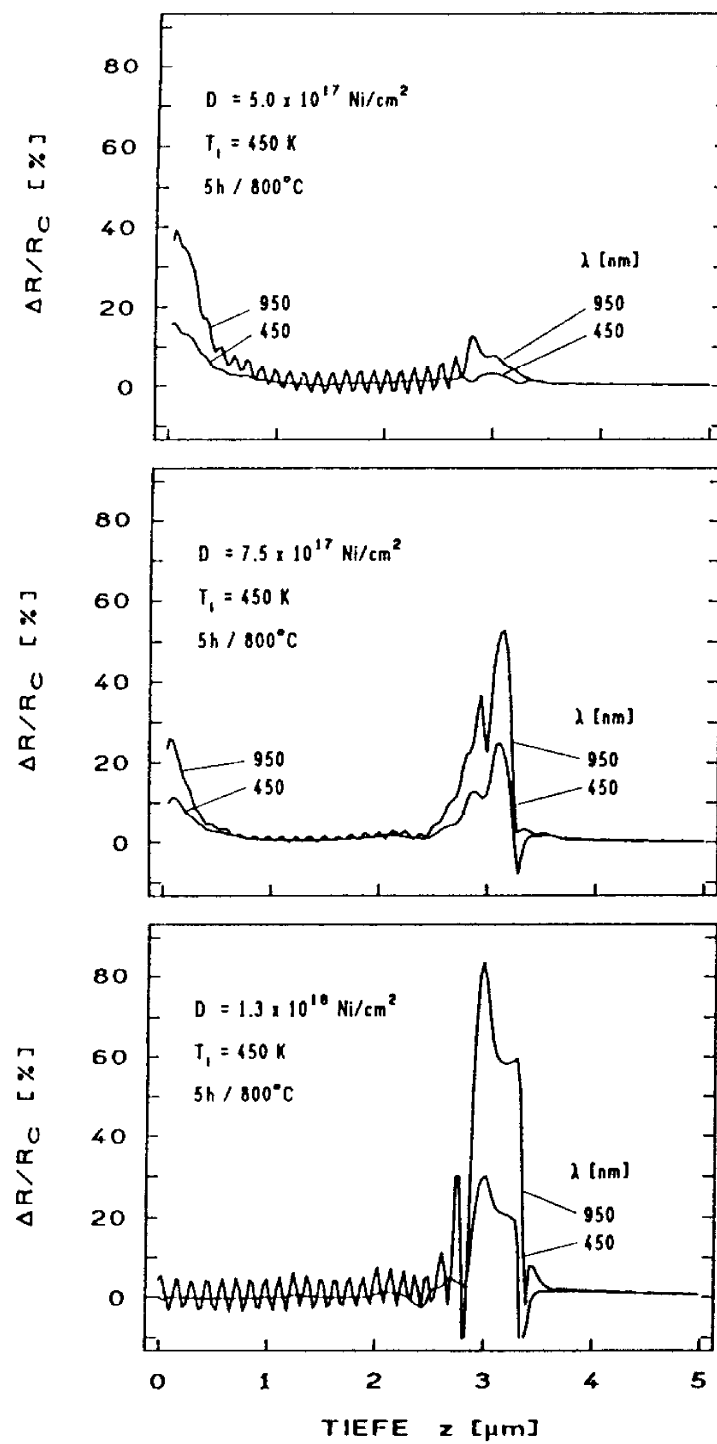


Abb. 6.45

Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung $\Delta R/R_c$ bei 450 und 950 nm nach Hochdosis-Ni-Implantation in Si bei 450 K und Tempern (5h/800 °C).

Flanke des "vergrabenen" Profils. Aufgrund der stärkeren Dämpfung der hin- und rücklaufenden Wellen sind bei der kleineren Wellenlänge keine Oszillationen zu beobachten.

Bei einer Dosis von $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ ist offenbar ein größerer Anteil an Nickel in der vergrabenen Schicht zurückgeblieben. Der vergrabene Teil des Profils unterteilt sich in zwei Maxima in 2.9 und 3.1 μm Tiefe mit einer deutlichen Einschnürung um $z = 3.0 \mu\text{m}$. Diese ist bei allen Wellenlängen an dieser Stelle zu beobachten und daher nicht auf Keilinterferenzen zurückzuführen.

Bei der höchsten Dosis ($1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$) lassen sich nach dem Tempern lichtmikroskopisch an der Oberfläche nur ganz vereinzelt Kristallite beobachten. Die optischen Messungen ergeben im Oberflächenbereich

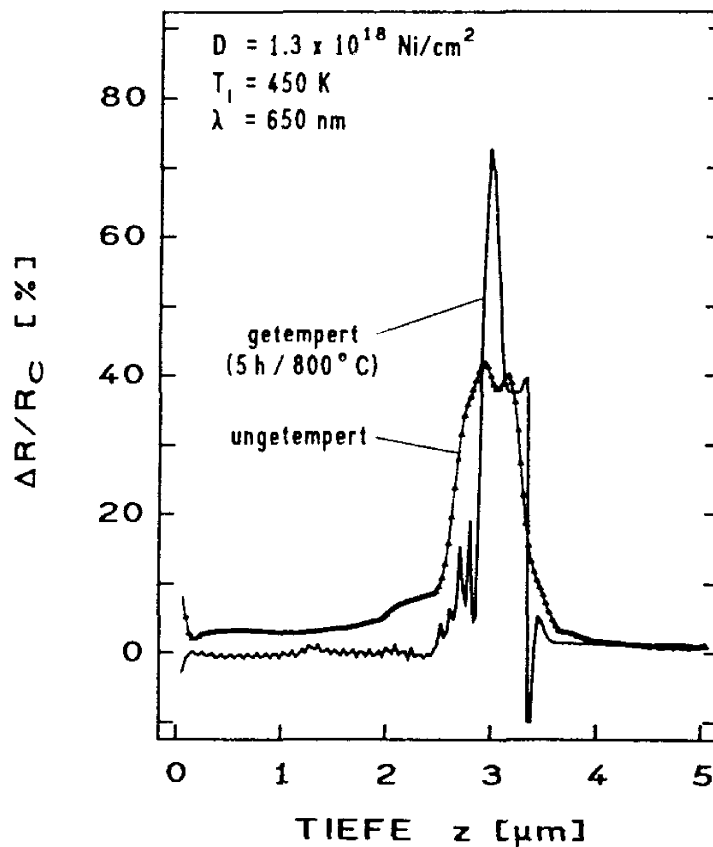


Abb. 6.46

Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung $\Delta R/R_C$ bei 650 nm für den ungetemperten und den getemperten (5h/800 °C) Zustand nach Hochdosis-Nickel-Implantation in Silizium ($D = 1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 450 \text{ K}$).

keine Reflektivitätserhöhung. Zwischen $z \approx 2.9$ und $z \approx 3.3 \mu\text{m}$ erhält man einen durch eine hohe Reflektivität gekennzeichneten Bereich, der durch steile Flanken begrenzt ist. Das sehr hohe Signal im vorderen Teil dieser Schicht sowie die Absenkungen an den Rändern sind stark fokussierungsabhängig und beruhen vermutlich auf Grenzflächenspannungen.

Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung bei 650 nm sind in Abb. 6.46 für den ungetemperten und den getemperten Zustand zur Verdeutlichung der Profilformänderung gegenübergestellt ($D = 1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$). Das Tempern führt offenbar in allen Tiefen $z \leq 4 \mu\text{m}$ zu erheblichen strukturellen Änderungen. Der Schwerpunkt des Profils für den getemperten Zustand ist gegenüber dem des breiteren Profils für den ungetemperten Zustand zu größeren Tiefen verlagert. Die bei 650 nm im hinteren Bereich der Schicht (getempertem Zustand) gemessene Reflektivitätsänderung von etwa 0.38 befindet sich in zufriedenstellender Übereinstimmung mit dem Wert von 0.36, der sich anhand der von Frampton et al. /221/ bei $\lambda = 632.8 \text{ nm}$ gemessenen optischen Konstanten von konventionell hergestelltem NiSi_2 berechnen läßt.

An entsprechenden Proben durchgeführte AES-Messungen /176,222/ der Ni-Verteilung ergeben sehr ähnliche Profilformen (Abb. 6.47). Es zeigt sich, daß bei der kleinsten Dosis etwa $\frac{2}{3}$ des Nickels in der oberflächennahen Schicht und $\frac{1}{3}$ im vergrabenen Teil des Profils enthalten sind. Für die Dosis von $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ sind die Anteile in etwa umgekehrt auf die oberflächennahe und die vergrabene Zone verteilt. Ähnliche Verhältnisse erhält man, wenn man die bei $\lambda = 950 \text{ nm}$ gemessenen Tiefenprofile der optischen Reflektivitätsänderung über entsprechende Tiefenintervalle integriert.

Die AES-Messungen zeigen deutlich (Abb. 6.47 c), daß bei einer Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ nach dem Tempern eine scharf begrenzte Schicht konstanter Nickelkonzentration vorliegt. Die aus den AES-Signalhöhen berechnete /176,222/ Ni-Konzentration entspricht hier nahezu der von Ni in NiSi_2 . Weiterhin findet man kleine Mengen an Nickel in schmalen Tiefenintervallen nahe der Schicht, insbesondere am vorderen Übergang. Eine durch Nickel hervorgerufene Signaländerung zeigt sich an dieser Stelle ($z = 2.7 - 2.8 \mu\text{m}$) auch in den optischen Profilen (Abb. 6.46).

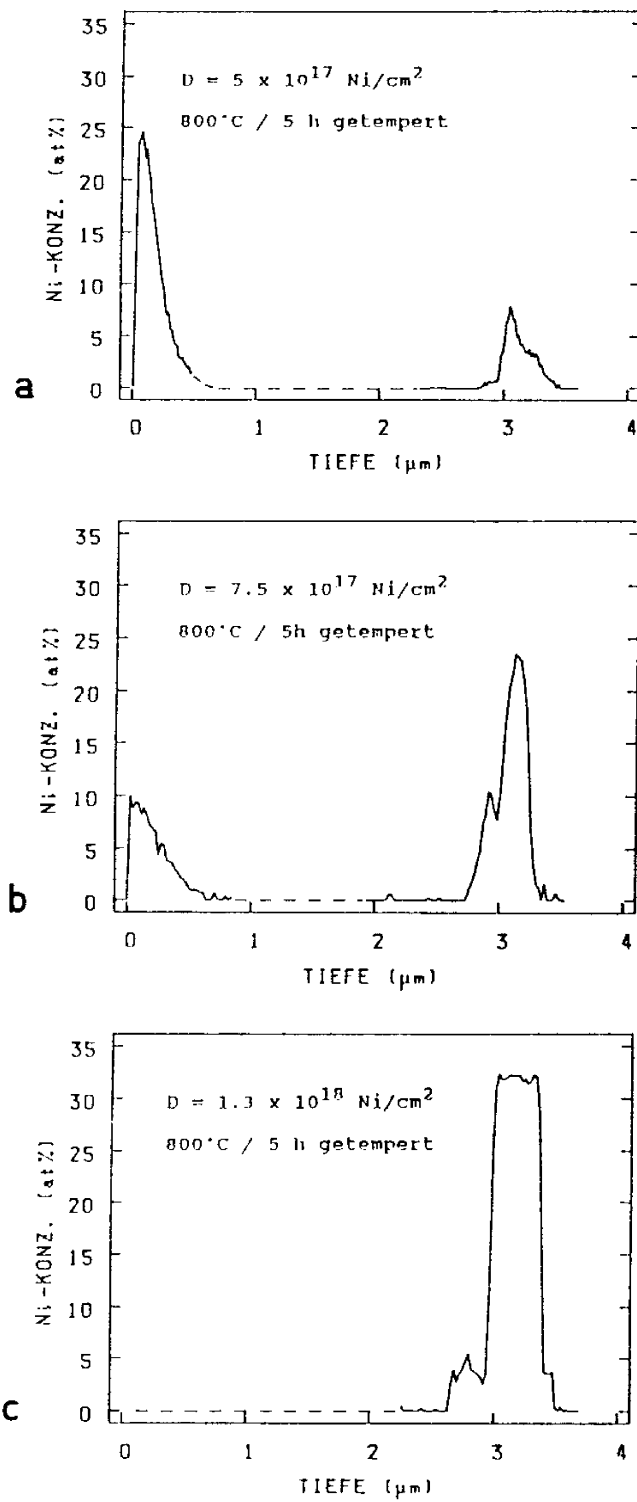


Abb. 6.47

Dosisserie von AES-Tiefenprofilen der Ni-Konzentration nach Hochdosis-Nickel-Implantation in Silizium ($T_i = 450 \text{ K}$) und Tempern (5h/800 °C) /176,222/.

Tiefenprofile des Ausbreitungswiderstandes von Nickelimplantaten verschiedener Dosis nach Temperbehandlung (5h/800 °C) werden in Abb. 6.48 miteinander verglichen. Wie aufgrund der oben dargestellten Meßergebnisse zu erwarten, treten bei Dosen von 5 und $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ ein oberflächennaher und ein tief vergrabener Bereich reduzierten Widerstandes auf. Entsprechend den verschiedenen Ni-Anteilen in den beiden Tiefenzonen und entsprechend den unterschiedlichen Ni-Dosen sind die Widerstandsverringerungen unterschiedlich stark ausgeprägt. Die mit den anderen Methoden beobachtete Aufspaltung des tiefliegenden Maximums in zwei Peaks für $D = 7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ sowie die der homogenen Schicht bei $D = 1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ vorgelagerten lokalen Maxima werden nicht aufgelöst. Für die Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ erkennt man die Bildung einer breiten Schicht konstanter hoher Leitfähigkeit in einer hochohmigen Umgebung.

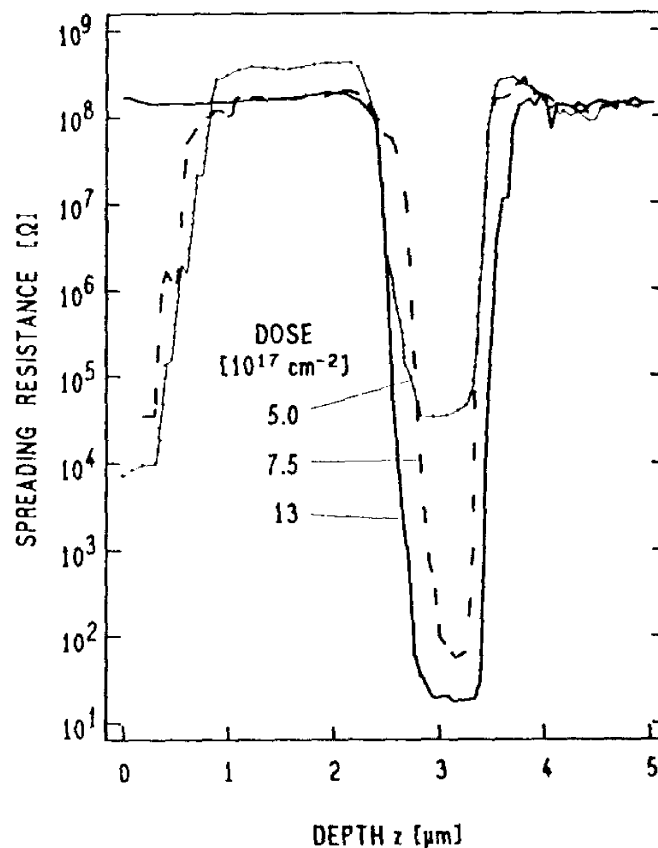


Abb. 6.48

Tiefenprofile des Ausbreitungswiderstandes nach Hochdosis-Ni-Implantation in Si (n-Phosphor, $\rho_0 = 85 - 110 \Omega \text{ cm}$) bei 450 K und Tempern (5h/800 °C).

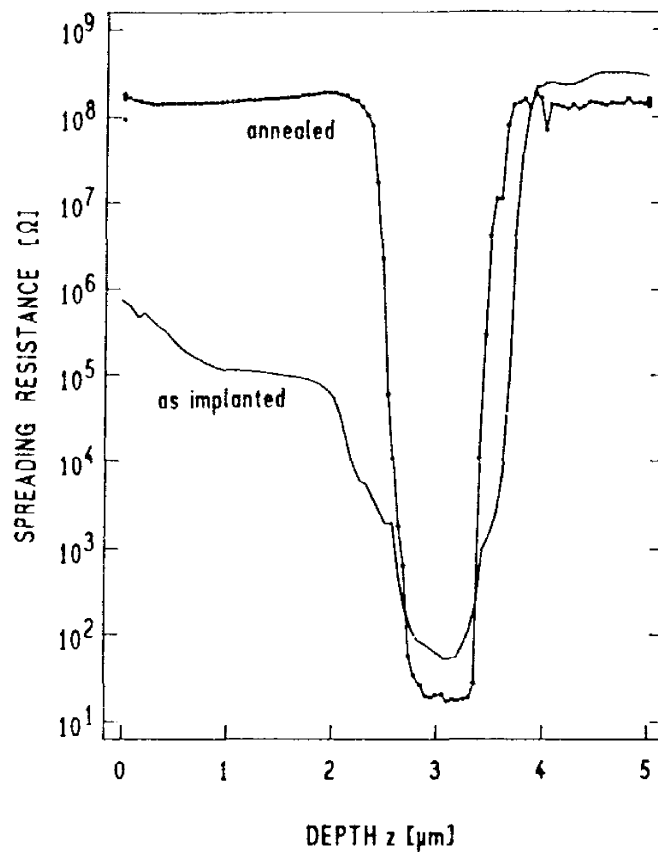


Abb. 6.49

Tiefenprofile des Ausbreitungswiderstandes nach Hochdosis-Ni-Implantation in Si (n-Phosphor, $\rho_0 = 85 - 110 \Omega \text{ cm}$, $T_i = 450 \text{ K}$, $D = 1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$) für den ungetemperten und den getemperten (5h/800 °C) Zustand.

Zum Vergleich ist das für eine Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ gemessene Profil in Abb. 6.49 noch einmal zusammen mit dem einer ungetemperten Probe dargestellt. Während in Tiefen $z \leq 2.3 \mu\text{m}$ nach dem Tempern ein um mehrere Größenordnungen erhöhter Widerstand vorliegt, ist im Bereich der Profilminima nur eine vergleichsweise geringe Widerstandsänderung festzustellen. Hierbei ist zu berücksichtigen, daß bereits im ungetemperten Zustand an dieser Stelle eine dünne, defektreiche NiSi_2 -Schicht besteht. Auch Untersuchungen an konventionell hergestellten und anschließend durch Ionenbeschuß stark strahlengeschädigten NiSi_2 -Filmen ergeben /223,109,113/, daß das Ausheilen von Schäden durch Tempern bei 600 - 800 °C mit vergleichsweise geringen Änderungen des elektrischen Widerstandes (Faktor 3 - 4) verbunden ist.

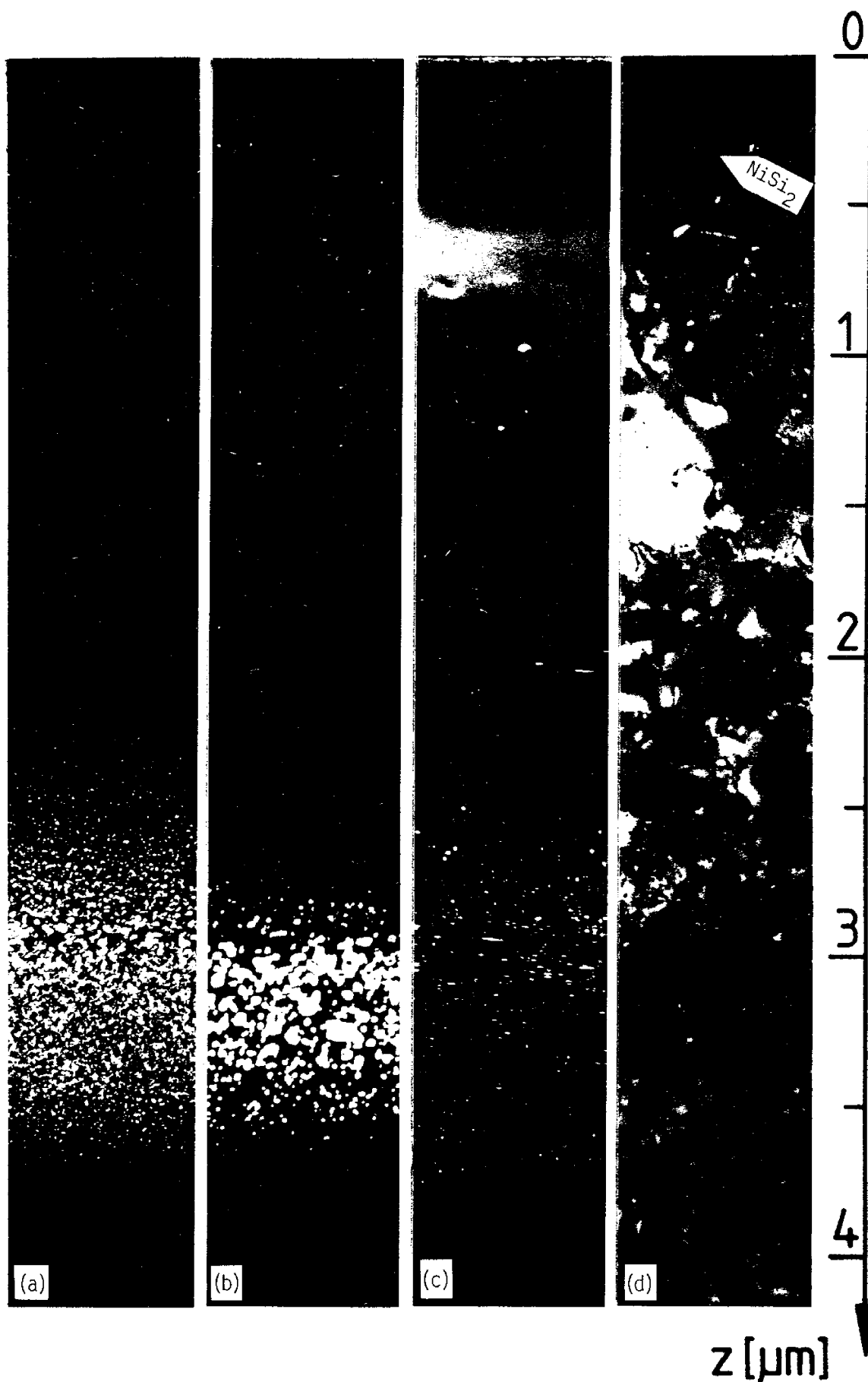
Für eine grobe Abschätzung sei angenommen, daß sich der Ausbreitungs-widerstand gemäß Gl. 4.6 proportional zum spezifischen Widerstand verhält und daß der spezifische Widerstand im Bereich oberhalb oder unterhalb der vergrabenen Schicht dem eines unimplantierten Wafers von $85 - 110 \Omega \text{ cm}$ entspricht. Man erhält dann für den spezifischen Widerstand der vergrabenen Schicht einen Wert in der Größenordnung von $10 \mu\Omega \text{ cm}$. Typische spezifische Widerstände für konventionell hergestellte NiSi_2 -Filme liegen bei $50 - 60 \mu\Omega \text{ cm}$ /91/.

Insgesamt zeigen somit die hier vorgestellten optischen, elektronen-spektroskopischen und elektrischen Untersuchungen, daß eine fünfstündige Temperbehandlung von Hochdosis-Nickel-Implantaten bei 800°C zu einer dosisabhängigen Umverteilung von Nickel zu einer vergrabenen Schicht und/oder zur Oberfläche führt. TEM/XTEM-Analysen geben näheren Aufschluß über die damit verbundenen strukturellen Änderungen.

Abb. 6.50 zeigt XTEM-Abbildungen für den ungetemperten (a) und den getemperten Zustand (b-d) bei einer Dosis von $5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$. Die bereits lichtmikroskopisch beobachteten Ausscheidungen an der Proben-oberfläche weisen eine Ausdehnung von bis zu $1.2 \mu\text{m}$ in vertikaler und $6.8 \mu\text{m}$ in lateraler Richtung auf (Abb. 6.50 d). Es handelt sich um NiSi_2 -Kristalle ohne feste Orientierungsbeziehung zur Siliziummatrix.

Zusätzlich dazu zeigt sich eine tief vergrabene Zone epitaktisch gewachsener NiSi_2 -Ausscheidungen (Abb. 6.50 b,c). Ähnlich wie im Zustand nach der Implantation liegt hier der größte Volumenanteil an NiSi_2 in Form von Typ-A orientierten Ausscheidungen vor. Die Verteilung

Abb. 6.50 =>
 XTEM-Dunkelfeldaufnahmen für eine Dosis von $5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$).
 (a) Ungetemperter, (b-d) getemperter (5h/800 °C) Zustand.
 (a) Typ-A NiSi_2 , $\vec{g} = (200)$, vgl. Abb. 6.27 (a);
 (b) Typ-A NiSi_2 , $\vec{g} = (00\bar{2})$, Orientierung $\sim \parallel [\bar{2}10]$;
 (c) Typ-B NiSi_2 , $\vec{g} = (\bar{2}0\bar{2})_{[111]}$ Typ-B NiSi_2 , Orientierung $\sim \parallel [\bar{1}01]$;
 (d) Bereich mit Oberflächenpräzipitat, $\vec{g} = (111)$, Orientierung $\sim \parallel [\bar{1}01]$.
 Oberflächennormale der getemperten Probe $\sim \parallel [\bar{3}21]$.



<= Abb. 6.50

von vergrabener Typ-A NiSi_2 ist nach dem Tempern wesentlich schmaler (vgl. Abb. 6.50 a,b). Kleine Ausscheidungen in den Flanken des Profils werden durch das Tempern offenbar zugunsten größerer Präzipitate aufgelöst. Der maximale Anteil an großen Ausscheidungen, welche Durchmesser bis zu $\sim 550 \text{ \AA}$ erreichen, sowie die höchste NiSi_2 -Dichte liegen in einer Tiefe von etwa $3.0 - 3.1 \text{ \mu m}$ vor. Dies ist die Tiefe, wo im Zustand nach der Implantation der Übergang zwischen dem Gebiet mit wenigen, aber großen Ausscheidungen und der Zone maximaler NiSi_2 -Konzentration bei kleinem mittlerem Ausscheidungsdialogmesser erfolgt (vgl. Abb. 6.50 a,b).

Die nach dem Tempern für eine Dosis von $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ vorliegende Schichtstruktur ist in Abb. 6.51 dargestellt. Ähnlich wie für die kleinere Dosis von $5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ sind an der Oberfläche isolierte große NiSi_2 -Ausscheidungen zu beobachten (Abb. 6.51 a). Zwischen diesen Ausscheidungen existiert eine schmale, oberflächennahe Zone mit zahlreichen NiSi_2 -Plättchen auf (111)-Ebenen ($z \approx 50 - 120 \text{ nm}$, Abb. 6.51 c). Der größte Teil der Ausscheidungen liegt in Form von Typ-A NiSi_2 -Kristalliten ($\varnothing \gtrsim 80 \text{ \AA}$) vor, die im Tiefenintervall zwischen ~ 2.4 und $\sim 3.6 \text{ \mu m}$ nachgewiesen werden können (Abb. 6.51 a,b). Vor allem in einer Zone zwischen ~ 3.0 und $\sim 3.3 \text{ \mu m}$ Tiefe befinden sich zahlreiche, insbesondere lateral gewachsene Präzipitate mit Kantenlängen von $\sim 2000 - 8500 \text{ \AA}$, die durch bis zu $\sim 3500 \text{ \AA}$ breite Zwischenräume getrennt sind. Die großen Ausscheidungen sind umgeben von kleineren Typ-A NiSi_2 -Teilchen ($\varnothing \approx 200-800 \text{ \AA}$), die in einer Zone in 2.9 \mu m Tiefe mit besonderer Dichte auftreten. Wie in Abb. 6.51 (a) zu erkennen ist, existiert zwischen dieser Zone und der Schicht großer Ausscheidungen ein schmaler, ausscheidungsverarmter Bereich.

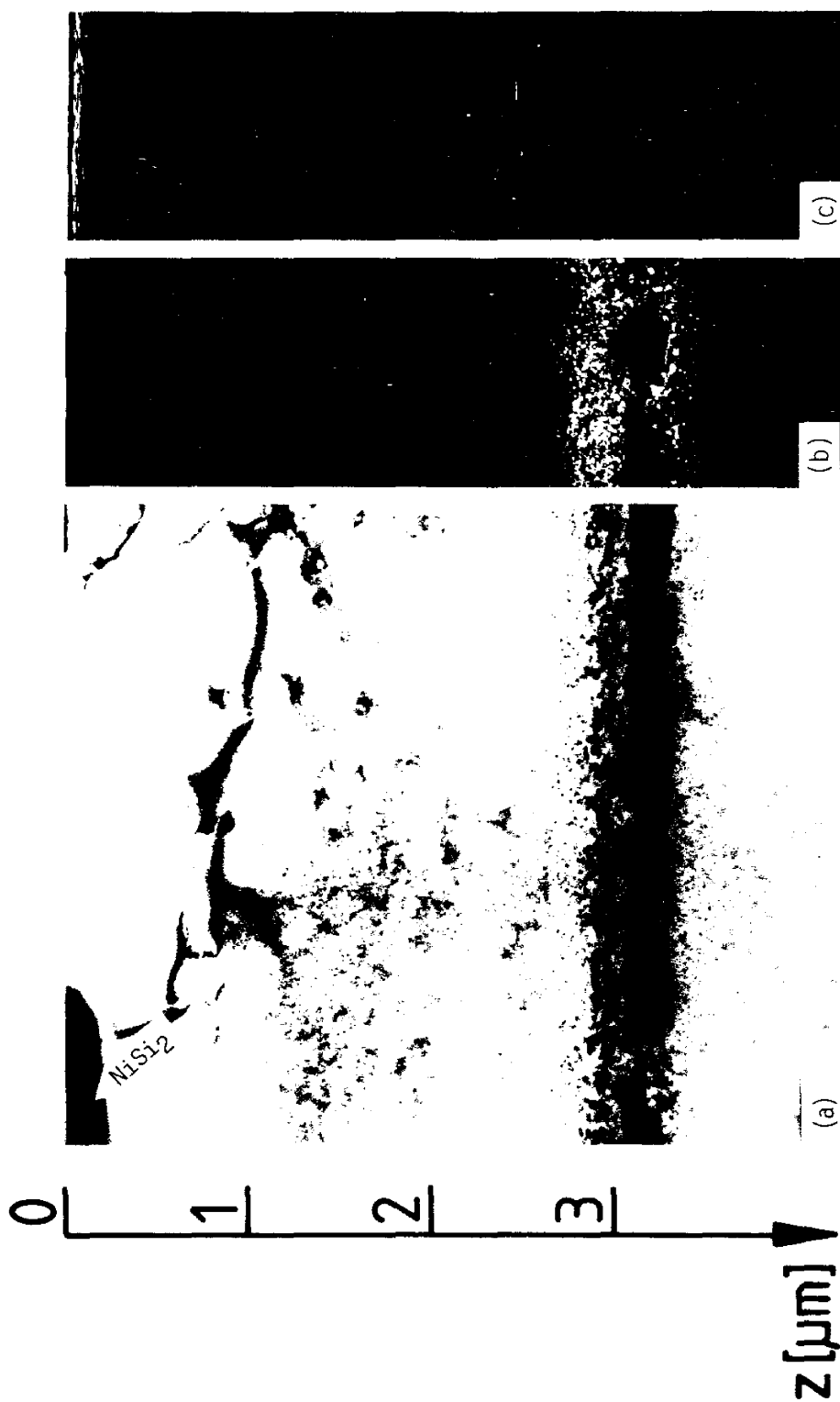


Abb. 6.51

XTEM-Aufnahmen der Ausscheidungsverteilung für eine Dosis von $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ im Zustand nach Tempern ($5\text{h}/800^\circ\text{C}$). Oberflächennormale $\parallel [\bar{2}11]$. (a) Hellfeld, Orientierung $\sim \parallel [\bar{2}11]$; (b) $(00\bar{2})$ -Dunkelfeld für Typ-A NiSi_2 , Orientierung $\parallel [\bar{7}50]$; (c) Typ-B NiSi_2 -Dunkelfeld mit einem $[111]$ -streak, Orientierung $\parallel [\bar{1}10]$. Die ausscheidungsverarmte Zone ist in (b) wegen der Probenkipfung nicht zu erkennen. Die großen NiSi_2 -Ausscheidungen erscheinen aufgrund von Absorption dunkel.

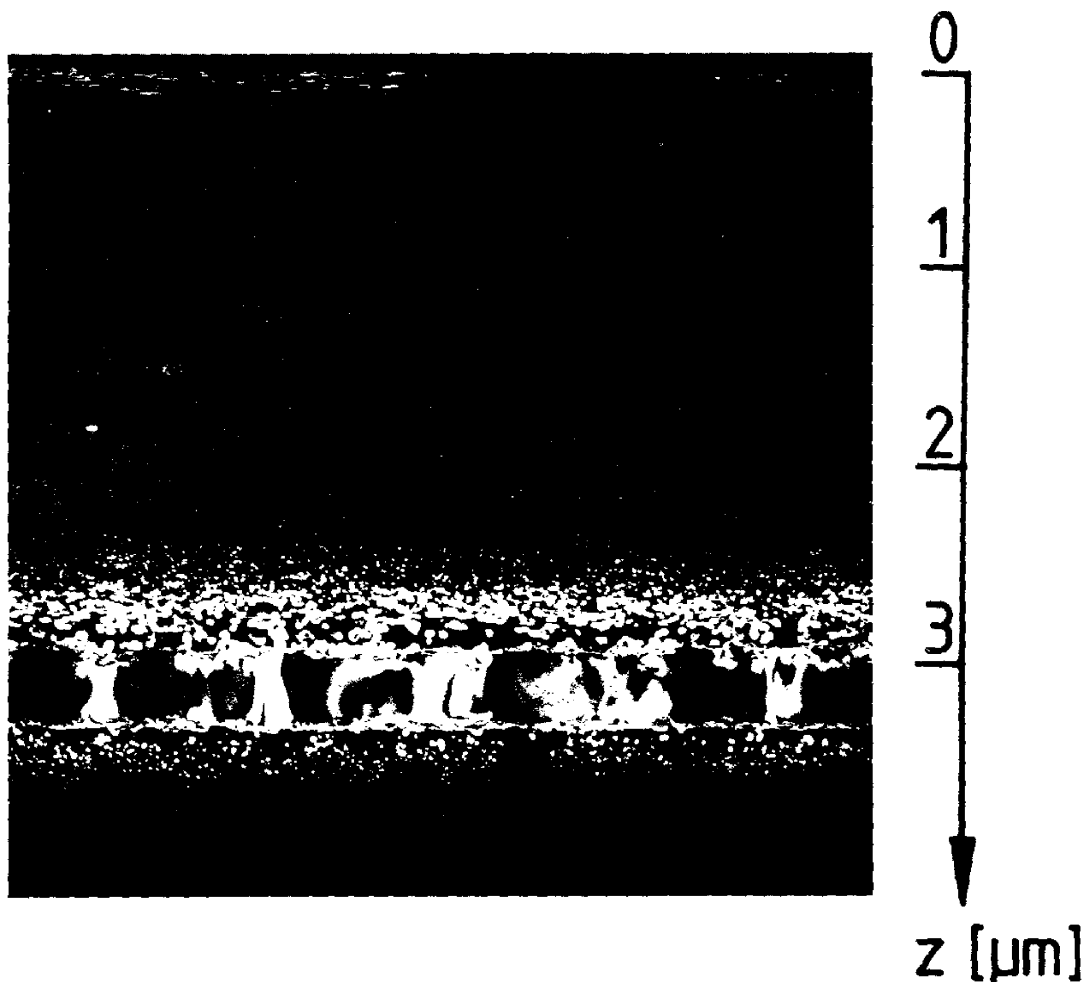


Abb. 6.52

XTEM-Dunkelfeldaufnahme der Schichtstruktur für eine Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ ($T_i = 450 \text{ K}$) nach Tempern (5h/800 °C). Die Kontraste innerhalb der vergrabenen, einkristallinen NiSi_2 -Schicht beruhen auf einer Variation der Probendicke. Probennormale $\parallel [01\bar{1}]$, Probenorientierung $\parallel [03\bar{5}]$, $\vec{g} = (\bar{2}00)$.

Bei einer Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ finden sich nach dem Tempern an der Oberfläche große NiSi_2 -Ausscheidungen nur ganz vereinzelt. Der größte Anteil an implantiertem Nickel findet sich in einer homogenen NiSi_2 -Schicht, die sich zwischen 2.96 ± 0.05 und $3.35 \pm 0.05 \text{ µm}$ Tiefe erstreckt (Abb. 6.52 und 6.53). XTEM-Untersuchungen über einen Bereich von mehr als 40 µm Breite zeigen, daß diese Schicht einkristallin ist. Zusammen mit der Siliziumdeckschicht und dem Substrat bildet sie ein heteroepitaktisches Typ-A/A/A Schichtsystem. Die NiSi_2 -Schicht ist umgeben von zwei schmalen Bändern aus NiSi_2 -Präzipitaten, die überwiegend Typ-A Orientierung aufweisen. Zwischen diesen Bändern mit

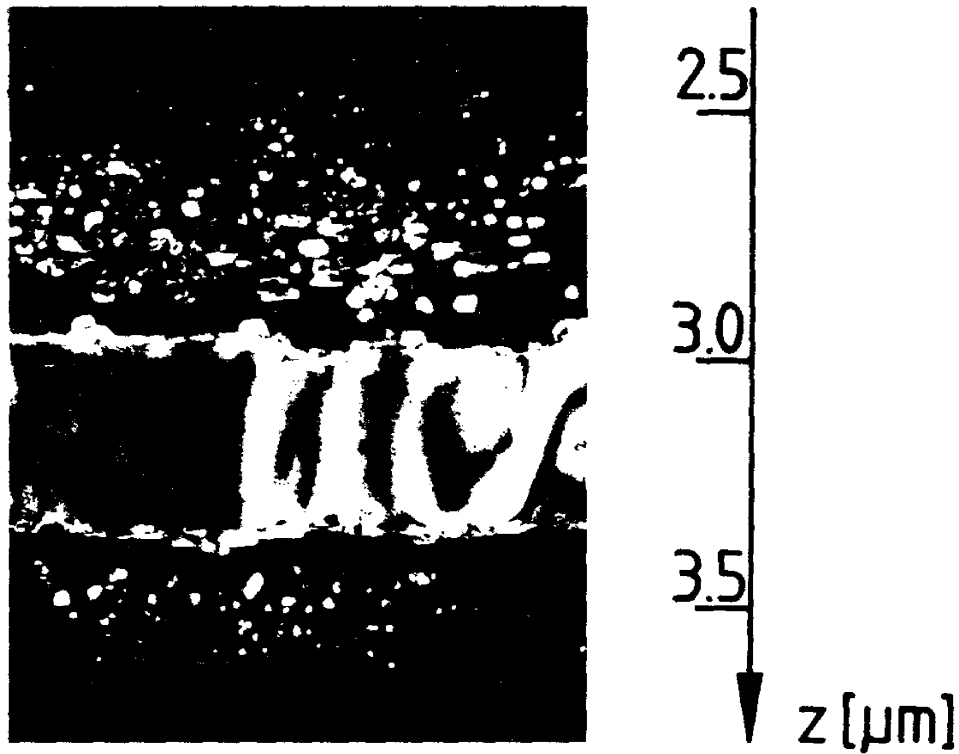


Abb. 6.53

Detailaufnahme der in Abb. 6.52 gezeigten Typ-A NiSi_2 -Schicht. In der vorliegenden $[01\bar{1}]$ -Orientierung sind die zwischen der Schicht und den Ausscheidungsbandern befindlichen Säume deutlich zu erkennen. $\vec{g} = (200)$.

maximaler NiSi_2 -Konzentration bei ~ 2.8 bzw. $\sim 3.5 \mu\text{m}$ und dem NiSi_2 -Kristall befinden sich dünne Zonen verringerter Ausscheidungsichte. Die lokal glatten Grenzflächen der NiSi_2 -Schicht sind facettiert, was – von vereinzelt Einschnürungen der Schicht abgesehen – zu Interfacebreiten von etwa $50 \pm 5 \text{ nm}$ (vorn) bzw. $35 \pm 5 \text{ nm}$ (hinten) führt (Abb. 6.53). Die Facettierung resultiert wahrscheinlich aus dem Zusammenwachsen der sich ausdehnenden Schicht mit den nahe den Grenzflächen vorhandenen größeren Ausscheidungen. Auch an in plane-view-Technik präparierten Proben durchgeführte Untersuchungen der Grenzschicht ergeben, daß die Facetten bevorzugt auf $\{111\}$ -Ebenen liegen.

Ähnlich wie bei einer Dosis von $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ zeigen sich in einer $\sim 0.3 \mu\text{m}$ dicken Oberflächenzone einige dünne NiSi_2 -Plättchen auf $\{111\}$ -Ebenen. In größeren Tiefen treten in der Siliziumdeckschicht solche Ausscheidungen (mittlerer Durchmesser $\sim 1500 \text{ \AA}$) nur sporadisch ($\sim 5 \mu\text{m}^{-3}$) auf.

Die dargestellten Untersuchungsergebnisse zeigen, daß sowohl die Probenoberfläche als auch die bereits nach der Implantation vorliegenden Ausscheidungen bei der Temperbehandlung als Senken für diffundierende Nickelatome wirken.

Hohe Metallkonzentrationen an der Probenoberfläche werden bei den meisten Langzeitdiffusionsexperimenten mit Übergangsmetallen in Silizium beobachtet /224/. Über die Nickeldiffusion in Silizium liegen verschiedene Arbeiten vor, die ein Aufsteilen des Ni-Konzentrationsprofils nahe der Probenoberfläche /225/ bzw. eine dort bevorzugte Bildung von NiSi_2 -Ausscheidungen /226/ nach dem Abschrecken der auf 1000 - 1100 °C erwärmten Wafer zeigen. Merkliche bzw. nahezu vollständige Ausdiffusion von Nickel wird in /218/ nach 20-minütiger Auslagerung von nickeldotierten Siliziumkristallen bei 900 bzw. 1050 °C beobachtet und vor allem dem beim Abkühlen (4 K/s) vorhandenen hohen Temperaturgradienten nahe der Oberfläche zugeschrieben.

Die auch in der vorliegenden Arbeit beobachtete Bildung einer nickelreichen Schicht nahe der Siliziumoberfläche wird durch die schnelle Zwischengitterdiffusion von Nickel bei der verwendeten Temperatur ermöglicht. Aus den von Bakhadyrkhanov et al. /213/ bestimmten Diffusionskoeffizienten erhält man für 5-stündiges Tempern bei 800 °C eine Diffusionslänge von nahezu 2 mm. Da bei den vorhandenen Ni-Konzentrationen die Löslichkeitsgrenze von Nickel in Silizium ($1,9 \times 10^{16} \text{ Ni/cm}^3$ bei 800 °C, /224/) auch während des Temporns erheblich überschritten wird, ist mit Ausscheidungen oder Ausdiffusion zu rechnen. Das Ausbleiben einer epitaktischen Orientierung der beobachteten Ausscheidungen deutet auf einen Einfluß der implantationsbedingten Kontamination der Siliziumoberfläche auf die Präzipitation hin.

In Konkurrenz zur Probenoberfläche kommen als Senken für diffundierende Ni-Atome auch die bereits nach der Implantation vorliegenden NiSi_2 -Ausscheidungen in Frage, wenn diese hinreichend groß sind. Bei der kleinsten betrachteten Dosis ($5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$) gibt es zunächst nur wenige genügend große Ausscheidungen. Nickel wird vor allem dort zurückbehalten, wo sich im implantierten Zustand der Übergang zwischen der Zone weniger, besonders großer Ausscheidungen und der Zone zahlreicher kleiner Präzipitate befindet ($z = 3,0 - 3,1 \text{ }\mu\text{m}$), weil sich

offenbar an dieser Stelle am schnellsten ausreichend große Ausscheidungen bilden können. Entsprechend den in Kap. 6.2.9 dargestellten Untersuchungen ist dies nicht die Tiefe maximaler NiSi_2 -Konzentration ($z \approx 3.25 \mu\text{m}$).

Der Anteil an zurückgehaltenem Nickel in der vergrabenen Schicht ist um so höher, je größer die bereits nach der Implantation vorliegenden Ausscheidungen sind. Hier sei noch einmal darauf hingewiesen, daß im implantierten Zustand im Bereich des Maximums der NiSi_2 -Verteilung bei einer Dosis von $7.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ zahlreiche Ausscheidungen miteinander zusammengewachsen sind und bei einer Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ eine geschlossene Schicht vorliegt (Kap. 6.2.9).

Dadurch, daß die nach der Implantation hauptsächlich in den Flanken der NiSi_2 -Tiefenverteilung vorhandenen kleineren Ausscheidungen beim Tempern zugunsten größerer Präzipitate aufgelöst werden, ergibt sich eine Vergrößerung der Ausscheidungsstruktur und letztlich eine Verringerung der Verteilungsbreite. Ein solcher Umlösungsprozeß ist als Ostwald-Reifung von Ausscheidungen bekannt [227].

Hierbei wird der Konzentrationsverlauf (Abb. 6.54) einer übersättigten Festkörperlösung in der Umgebung von zwei unterschiedlich großen, kugelförmigen Ausscheidungen (Radius r_1, r_2) betrachtet, deren gegenseitiger Abstand ρ groß gegen ihre Durchmesser ist. In Abb. 6.54 gibt c_p die Konzentration im Teilchen, c_a die Matrixkonzentration an der

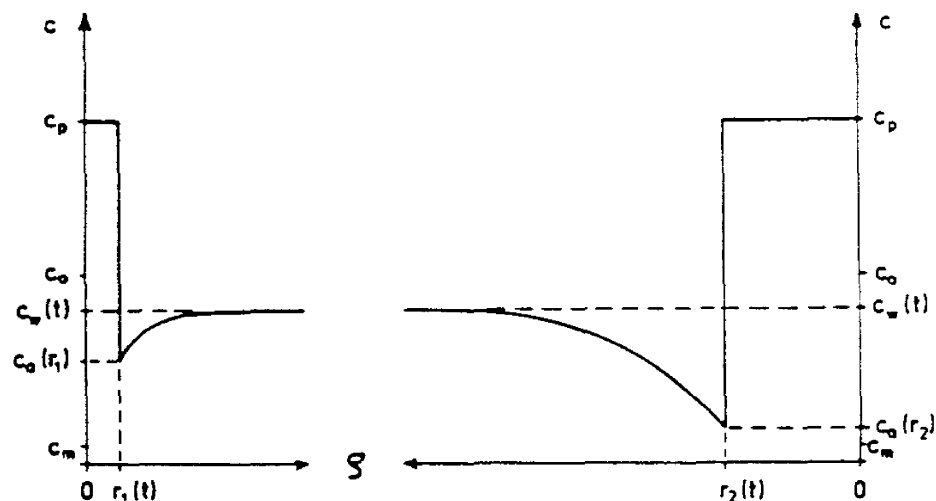


Abb. 6.54

Konzentrationsverlauf für zwei wachsende Ausscheidungen unterschiedlicher Größe nach [227] (Erläuterungen im Text).

Teilchenoberfläche im Gleichgewicht mit dem Teilchen, c_w die Matrixkonzentration in großer Entfernung zum Teilchen, c_0 die Startkonzentration und c_m die Gleichgewichtskonzentration an. In der Teilchenumgebung bilden sich Diffusionshöfe verringerter Fremdatomkonzentration aus. Sie sind umso stärker ausgeprägt, je größer der Teilchenradius ist. Daraus ergibt sich eine höhere Wachstumsrate im Falle des größeren Teilchens. Beide Teilchen wachsen, solange die Bedingung $c_w > c_a(r_1) > c_a(r_2)$ erfüllt ist. Dadurch reduziert sich jedoch zunehmend die Matrixkonzentration c_w . Unterschreitet diese die in der Berandung eines Teilchens erforderliche Gleichgewichtskonzentration, $c_a(r_1) > c_w > c_a(r_2)$, so stoppt das Wachstum des kleineren Teilchens und es beginnt sich zugunsten des Wachstums der größeren Ausscheidung aufzulösen.

Betrachtet man die Größenverteilungen der nach der Implantation vorliegenden NiSi₂-Ausscheidungen und nimmt man einen qualitativ gleichen Umlösungsvorgang im hier vorliegenden Fall hoher Ausscheidungsichte an, so ergibt sich folgende mögliche Interpretation für das beobachtete Temperverhalten:

Im implantierten Zustand erhält man bei hohen Dosen eine Zone grober Ausscheidungsstruktur, in deren hinterem Teil bei einer Dosis von 7.5×10^{17} Ni/cm² bereits zusammengewachsene NiSi₂-Bereiche existieren. Für eine Dosis von 1.3×10^{18} Ni/cm² ist die Situation vergleichbar, allerdings hat hier die Koaleszenz von Ausscheidungen bereits zur Bildung einer geschlossenen Schicht mit einer vorgelagerten Zone großer Präzipitate geführt. Diese Schicht bzw. die zusammengewachsenen NiSi₂-Bereiche bei einer Dosis von 7.5×10^{17} Ni/cm² stellen auch im Vergleich zur Oberfläche effektive Senken dar. Sie wachsen folglich schnell an, insbesondere schneller als die weniger großen vorgelagerten Ausscheidungen. Dieser Unterschied in der Wachstumsrate wird noch dadurch verstärkt, daß im implantierten Zustand die Dichte an kleinen, möglicherweise auflösbaren Präzipitaten oberhalb und unterhalb der Zone grober Ausscheidungsstruktur bzw. zu beiden Seiten der NiSi₂-Schicht unterschiedlich hoch ist. Darüberhinaus wird durch den Dichteunterschied ein Wachstum der NiSi₂-Schicht bzw. der zusammenhängenden NiSi₂-Bereiche zu größeren Tiefen begünstigt. Somit bilden sich aus den zusammengewachsenen NiSi₂-Ausscheidungen ($D = 7.5 \times 10^{17}$ Ni/cm²) bzw. der dünnen NiSi₂-Schicht ($D = 1.3 \times 10^{18}$ Ni/cm²) beim Tempern die beobachtete unterbrochene sowie die geschlossene breite NiSi₂-Schicht.

Auch an die großen Ausscheidungen im vorderen Teil der Zone grober Ausscheidungsstruktur werden beim Tempern Nickelatome angelagert. Dadurch erhöht sich deren Stabilität gegen Auflösung zugunsten anderer Ausscheidungen und die Nickelkonzentration in kleineren Tiefen (abgesehen von der oberflächennahen Zone) nimmt ab. Dennoch verlieren diese Ausscheidungen parallel Nickelatome an die schneller gewachsenen, ausgedehnteren NiSi_2 -Bereiche in größerer Tiefe. Der resultierende Nickelfluß reicht zur Bildung einer geschlossenen Schicht an dieser Stelle oder zum Zusammenwachsen mit den ausgedehnteren NiSi_2 -Bereichen in größeren Tiefen nicht aus, es bleibt ein Band größerer NiSi_2 -Teilchen.

Durch die Saugwirkung großer Ausscheidungen auf diffundierende Nickelatome bilden sich zu beiden Seiten der geschlossenen bzw. unterbrochenen NiSi_2 -Schicht ($D = 7.5 \times 10^{17}$ bzw. $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$) ausscheidungsverarmte Säume aus.

Die in den Ausscheidungsbändern außerhalb dieser Säume vorliegenden großen Präzipitate bilden lokale Senken, an denen bei fortschreitendem Tempern die vornehmlich in den Ausläufern der NiSi_2 -Verteilung freigesetzten Nickelatome angelagert werden können. Diese müssen für ein weiteres Wachstum der geschlossenen bzw. unterbrochenen NiSi_2 -Schicht aufgelöst werden. Durch längeres Tempern könnte dies zu erreichen sein.

Untersuchungen nach Verlängerung der Temperzeit auf 20 Stunden zeigen für eine Dosis von $1.3 \times 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ eine Dickenzunahme der vergrabenen NiSi_2 -Schicht um etwa $0.05 \mu\text{m}$ und eine Verringerung der lateralen Ausdehnung der in den Bändern vorliegenden Ausscheidungen um ca. 20 %. Berücksichtigt man, daß die Auflösung der Ausscheidungen zugunsten einer dickeren NiSi_2 -Schicht mit einer Verringerung der Gesamtgrenzflächenenergie einhergeht, so ist zu erwarten, daß sich bei dieser Dosis durch eine weitere Steigerung der Temperzeit bei 800°C ein "verbessertes" $\text{Si/NiSi}_2/\text{Si}$ -Schichtsystem ohne Ausscheidungsbänder herstellen läßt. Die Optimierung der Temperparameter ist Gegenstand derzeit durchgeführter Untersuchungen /176,192/.

Abschließend seien die hier dargestellten Ergebnisse den in der Einleitung erwähnten Untersuchungen zur Ionenstrahlsynthese vergrabener metallischer Schichten durch Hochdosisimplantation im keV-Energiebereich gegenübergestellt.

White et al. /23/ gelingt die Erzeugung eines Systems diskreter Schichten bestehend aus 600 Å Si, 1100 Å CoSi_2 und dem Siliziumsubstrat durch 200 keV Co-Hochdosisimplantation ($D = 3 \times 10^{17} \text{ Co/cm}^2$) in (100) oder (111) Silizium bei 350 und 450 °C und anschließendes Tempern bei 600 °C (1h) und 1000 °C (0.5 h). Die Siliziumdeckschicht sowie die CoSi_2 -Schicht sind einkristallin (Typ-A/A/A-Heteroepitaxie wie im hier dargestellten Fall des zu CoSi_2 isomorphen NiSi_2), wobei die Deckschicht allerdings zahlreiche Fehlpassungsversetzungen und Öffnungen (pinholes) enthält /24/. Die vergrabene metallische Schicht zeichnet sich durch einen besonders niedrigen spezifischen Widerstand ($\rho \approx 14 \mu\Omega \text{ cm}$ bei 300 K) aus /24/. Mit Hilfe von RBS- und TEM-Analysen finden White et al. /28/ eine Schwellkonzentration von $18.5 \pm 0.5 \text{ at.\% Co}$, die im Maximum der Ionenverteilung vorliegen muß, damit sich beim Tempern unter den genannten Bedingungen eine kontinuierliche CoSi_2 -Schicht ergibt. Die Tatsache, daß sich durch keV-Implantation ein vergrabenes Co-Profil mit entsprechenden Maximumskonzentrationen erzeugen läßt, ist wegen der bei diesen Energien beträchtlichen Sputtererosion der Oberfläche verwunderlich /23/. Für Implantationen bei Raumtemperatur und -196 °C erhalten White et al. — wie auch für höhere Implantationstemperaturen zu erwarten wäre — den Hauptanteil an Kobalt an der Oberfläche und nehmen daher an, daß bei Hochtemperaturimplantationen eine Eindiffusion von Kobalt die Bildung vergrabener Profile unterstützt. Dagegen deuten neuere Untersuchungen von van Ommen et al. /29/ eher auf einen chemischen Einfluß des implantierten Kobalts auf die Sputterrate hin.

Die von White et al. beschriebene Synthese vergrabener CoSi_2 -Schichten durch keV Co-Implantation in Silizium wurde inzwischen durch andere Gruppen unter ähnlichen /26,30,32,33/ oder abgeänderten /29,32,34,35/ experimentellen Bedingungen weitgehend reproduziert. Die neueren Untersuchungen befassen sich dabei auch detaillierter mit dem nach der Implantation vorliegenden Zustand /34,35/. Dabei wird festgestellt, daß bereits vor dem Tempern epitaktische CoSi_2 -Ausscheidungen vorliegen, wie hier beschrieben für den Fall der Ni-Implantation. Kohlhoff et al. /33/ gehen daher ebenfalls davon aus, daß das Aufsteilen des Metallatomprofils bei Tempern auf einer im Sinne der Ostwald-Reifung zu beschreibenden Umlösung von Präzipitaten beruht.

White et al. /25,28,31/ stellen auch vergrabene Schichten aus CaSi_2 , CrSi_2 , NiSi_2 , YSi_2 und $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ her. Im Falle von Ca-, Cr- und

Y-Implantationen sind die Schichten – offenbar ähnlich wie hier – umgeben von Ausscheidungsbändern, die jedoch durch Kurzzeittempern (10 s) bei 1300 °C teilweise abgebaut werden können. Die Autoren weisen darauf hin /31/, daß solche Ausscheidungszonen in ihren Si/CoSi₂/Si- und Si/NiSi₂/Si-Schichtstrukturen nicht auftreten. Andererseits werden CoSi₂-Ausscheidungen außerhalb einer kontinuierlichen vergrabenen Disilizidschicht auch von Bulle-Lieuwma et al. /34/ beobachtet, die allerdings einstufig (1000 °C) tempern. In dieser Arbeit wird außerdem über starke Zwillingsbildung innerhalb der Siliziumdeckschicht bei der Verwendung von (111)-Wafern berichtet.

Eine detaillierte Charakterisierung der von White et al. erzeugten Silizidschichten liegt außer für CoSi₂ bisher nicht vor. Die Autoren beschreiben ihre durch 200 keV Ni-Implantation ($D = 2.5 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$, $T_i = 250 \text{ °C}$) in Silizium und Tempern (1 h/550 °C, 0.5 h/900 °C) erzeugten Schichtsysteme als "vergleichbar zu denen mit CoSi₂" /31/. Hierbei wird allerdings durch RBS-Analysen eine geringfügig überhöhte Ni-Konzentration (35 at.%) in der NiSi₂-Schicht und – vermutlich aufgrund der unterschiedlichen Temperbedingungen – eine höhere Schädigung der Siliziumdeckschicht festgestellt /25/.

7. Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit behandelt Untersuchungen zur Ionenstrahlsynthese vergrabener metallischer Schichten durch 6 MeV ^{58}Ni -Implantation in Silizium. Durch Messungen der optischen Reflektivitätsänderung und des Ausbreitungswiderstandes sowie durch elektronenmikroskopische Untersuchungen werden die durch die Implantation hervorgerufenen strukturellen und elektrischen Veränderungen charakterisiert, wobei insgesamt ein Dosisbereich von $10^{12} - 10^{18} \text{ Ni/cm}^2$ erfaßt wird.

Die optisch gemessene Strahlenschädigung kann über einen weiten Dosis- und Temperaturbereich mit Hilfe eines für die 2 MeV Si-Eigenimplantation entwickelten Schädigungsmodells /72/ beschrieben werden. Das Modell berücksichtigt die Produktion, das Verclustern und die Rekombination von Punktdefekten sowie die Produktion und das stimulierte Wachstum amorpher Bereiche.

Der temperaturabhängige Beitrag dieser Prozesse zur Entwicklung der Schädigung durch 6 MeV Ni-Implantation wird anhand von Modellparametern dargestellt und mit entsprechenden Beiträgen nach 2 MeV Si-Eigenimplantation verglichen. Die ermittelte höhere Defektproduktion und -rekombination beim Beschuß mit Ni-Ionen läßt sich vor allem auf deren höhere Masse zurückführen. Dagegen wird offenbar die Bildung von Punktdefektclustern bei den betrachteten Temperaturen hauptsächlich vom Targetmaterial und weniger von der Projektilsorte bestimmt.

Mit zunehmender Dosis zeigt sich ein wachsender Einfluß des deponierten Nickels auf die Entwicklung der Schädigung. Dieser äußert sich in einem unerwartet starken Anstieg der kritischen Dosis, die zum Erreichen der Amorphisierung in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft notwendig ist, mit steigender Targettemperatur. Bei 450 K läßt sich in Bereichen hoher Ni-Konzentration vollständige Unterdrückung der Amorphisierung beobachten. In Tiefen geringeren Ni-Gehalts wird in einem begrenzten Dosisintervall eine vorübergehende Amorphisierung festgestellt.

Das Temperaturverhalten der die Amorphisierung beschreibenden Modellparameter legt nahe, daß der Einfluß auf die Amorphisierung auf einer durch die Anwesenheit von Nickel geförderten Kristallisation der bei der Implantation erzeugten quasi-flüssigen spike-Volumina beruht. Ein

geändertes Kristallisationsverhalten läßt sich vor dem Hintergrund eines zunehmend metallischen Charakters der Si-Si-Bindungen durch die Gegenwart von Ni-Atomen /205/ interpretieren.

Bei Targettemperaturen von 450 K und Dosen ab 1×10^{16} Ni/cm² findet man – ähnlich wie bei Si-Eigenimplantationen /70,71/ mit vergleichbaren Implantationsparametern – eine Umwandlung von Punktdefektclustern zu ausgedehnten Defekten in Form von {113}-Stapelfehlern, Versetzungsringen und ungeordneten Versetzungsnetzwerken. Diese Defektumwandlung vollzieht sich zuerst in der Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft. Hierbei stellt die Bildung von Stapelfehlern eine Übergangsphase dar, bei Dosen ab $\sim 5 \times 10^{16}$ Ni/cm² dominieren Versetzungen im Bereich des Maximums der nuklearen Bremskraft.

Bei 450 K-Implantationen wird eine dosisabhängige Verlagerung des Ni-Konzentrationsprofils zur Tiefe maximaler nuklearer Bremskraft beobachtet, die auf eine Getterwirkung der hier vorliegenden Defekte hindeutet. Eine bevorzugte Bildung von Typ-A NiSi₂-Ausscheidungen entlang von Versetzungen wird nachgewiesen.

Epitaktische NiSi₂-Ausscheidungen werden nach Ni-Hochdosisimplantationen bei 450 K in Form polyedrischer Kristallite mit Typ-A oder Typ-B Orientierung beobachtet. Zusätzlich finden sich dünne Typ-B NiSi₂-Plättchen auf {111}-Ebenen, wobei die (111)-Ebene parallel zur Substratoberfläche bevorzugt ist. Bei hinreichend hohen Dosen liegt der größte Anteil an NiSi₂ in Form polyedrischer Ausscheidungen mit Typ-A Orientierung vor. Typ-B NiSi₂-Ausscheidungen existieren bevorzugt in Bereichen geringer Ni-Konzentration. Bei der kleinsten Dosis (2×10^{16} Ni/cm²), für die elektronenmikroskopisch NiSi₂-Ausscheidungen nachgewiesen werden, treten ausschließlich NiSi₂-Plättchen auf.

Zur Interpretation der beobachteten Konzentrationsabhängigkeit der Bildung epitaktischer Ausscheidungen mit Typ-A oder Typ-B Orientierung wird ein Keimbildungs- und Wachstumsmodell /216/ herangezogen und modifiziert. Hieraus ergibt sich eine bevorzugte Keimbildung und ein vor allem flächenhaftes Wachstum für Typ-B NiSi₂. Für Typ-A NiSi₂ erhält man ein erheblich begünstigtes, auch volumenhaftes Wachstum.

Für Dosen ab $3 \times 10^{17} \text{ Ni/cm}^2$ wird in konstanter Tiefe eine Zone besonders großer, in verringerter Dichte auftretender Ausscheidungen beobachtet, die dem Bereich maximaler NiSi_2 -Konzentration vorgelagert ist. Die Senkenwirkung großer Ausscheidungen auf die eingebrachten Ni-Atome wird hinsichtlich ihres Einflusses auf die Entwicklung der Tiefenverteilung von NiSi_2 -Ausscheidungen diskutiert.

Durch das Zusammenwachsen hauptsächlich Typ-A orientierter, epitaktischer NiSi_2 -Ausscheidungen im Bereich des Konzentrationsmaximums erhält man bei hinreichend hohen Dosen bereits im Zustand nach der Implantation eine zusammenhängende NiSi_2 -Schicht, die durch hohe Leitfähigkeit charakterisiert ist.

Das Tempern von 450 K-Hochdosisimplantaten bei 800° C führt zu einer dosisabhängigen Umverteilung der Ni-Atome. Bei kleineren Dosen diffundiert ein beträchtlicher Anteil des Nickels zur Oberfläche. Mit zunehmender Dosis wird ein größerer Anteil an Nickel in einer vergrabenen Schicht zurückbehalten. Das Aufsteilen des Ni-Konzentrationsprofils an dieser Stelle läßt sich im Sinne der Ostwald-Reifung /227/ der nach der Implantation vorliegenden Ausscheidungen verstehen. Liegt bei genügend hohen Dosen nach der Implantation bereits eine geschlossene, vergrabene NiSi_2 -Schicht vor, so führt das Tempern zur Bildung eines heteroepitaktischen Typ-A/A/A - Si/ NiSi_2 /Si - Schichtsystems, wobei unter den gewählten Temperbedingungen der vergrabene NiSi_2 -Einkristall von schmalen Ausscheidungsbändern umgeben ist.

Die durchgeführten Temperexperimente und derzeit fortschreitenden Untersuchungen /176,192/ zeigen bereits, daß sich unter veränderten Temperbedingungen der Ni-Gehalt in den Ausscheidungsbändern erheblich reduzieren läßt und verbesserte Schichtstrukturen erreichbar sind.

ANHANG

A Strukturfaktoren

In Tab. A1 sind für niedrig indizierte Reflexe die Quadrate der Strukturfaktoren F_{hkl} von Si und NiSi_2 aufgelistet, berechnet nach Gl. 4.8 und 4.10 mit den in /181/ angegebenen Atomformfaktoren $f(\theta)$ für 100 keV Elektronen.

Tab. A1

hkl	F_{hkl}^2 NiSi_2	F_{hkl}^2 Si
002	61.17	-----
004	297.85	85.00
022	684.49	226.05
024	0.40	-----
044	124.68	31.92
111	270.13	338.71
113	94.02	72.56
133	54.61	33.02
222	3.93	-----
224	183.89	49.16
244	0.01	-----
333	37.83	20.47
444	71.95	18.52

Das Beugungsbild von NiSi_2 (kubische CaF_2 -Struktur) genügt prinzipiell fcc-Auswahlregeln. Für NiSi_2 sind, anders als bei Si, Reflexe erlaubt, bei denen die Summe der Millerindizes durch 2, aber nicht durch 4 teilbar ist.

B Richtungstransformation in Typ-B NiSi₂

Zur Interpretation von Beugungsbildern müssen die Richtungszusammenhänge zwischen den epitaktischen Ausscheidungen und der Siliziummatrix bekannt sein. Bei Typ-A NiSi₂ entsprechen alle Richtungen denen der Matrix. Typ-B NiSi₂ hat eine gemeinsame <111>-Richtung mit Silizium, alle anderen Kristallrichtungen sind gegenüber der gemeinsamen Achse um 180° gedreht. Für eine solche Zwillingsgeometrie ergibt sich nach /181/ in kubischen Kristallen aus einer [hkl]-Richtung die neue Richtung [h'k'l'] gemäß

$$h' = \frac{p(ph+2qk+2rl) - h(q^2+r^2)}{p^2+q^2+r^2}$$

$$k' = \frac{q(2ph+qk+2rl) - k(p^2+r^2)}{p^2+q^2+r^2}$$

$$l' = \frac{r(2ph+2qk+rl) - l(p^2+q^2)}{p^2+q^2+r^2}$$

wobei [pqr] die Zwillingsachse angibt. Hiermit berechnete Richtungstransformationen sind für einige wichtige Kristallrichtungen in Tab. A2 für die vier möglichen <111>-Zwillingsachsen zusammengefaßt.

Tab. A2

pqr	[111]	[11 $\bar{1}$]	[1 $\bar{1}$ 1]	[$\bar{1}$ 11]
hkl	h' k' l'			
001	$\frac{1}{3}[22\bar{1}]$	$\frac{1}{3}[\bar{2}\bar{2}1]$	$\frac{1}{3}[\bar{2}21]$	$\frac{1}{3}[2\bar{2}1]$
010	$\frac{1}{3}[2\bar{1}2]$	$\frac{1}{3}[2\bar{1}\bar{2}]$	$\frac{1}{3}[\bar{2}\bar{1}2]$	$\frac{1}{3}[\bar{2}\bar{1}2]$
$\bar{1}00$	$\frac{1}{3}[1\bar{2}\bar{2}]$	$\frac{1}{3}[1\bar{2}2]$	$\frac{1}{3}[12\bar{2}]$	$\frac{1}{3}[122]$
01 $\bar{1}$	$[0\bar{1}1]$	$\frac{1}{3}[41\bar{1}]$	$\frac{1}{3}[\bar{4}1\bar{1}]$	$[0\bar{1}1]$
101	$\frac{1}{3}[141]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$	$\frac{1}{3}[1\bar{4}1]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$
$\bar{1}01$	$[10\bar{1}]$	$\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{4}1]$	$[10\bar{1}]$	$\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{4}1]$
111	$[111]$	$\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}\bar{5}]$	$\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{5}\bar{1}]$	$\frac{1}{3}[\bar{5}\bar{1}\bar{1}]$
$\bar{1}\bar{1}1$	$\frac{1}{3}[5\bar{1}\bar{1}]$	$\frac{1}{3}[1\bar{5}\bar{1}]$	$\frac{1}{3}[1\bar{1}\bar{5}]$	$[\bar{1}\bar{1}1]$

C Überlagerung von Beugungsmustern

Mit Hilfe der oben angegebenen Richtungstransformation können Beugungsmuster berechnet werden, die bei Vorliegen von Typ-A und Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen mit verschiedenen Zwillingsachsen zu erwarten sind. Abb. A1 (a) zeigt ein $[01\bar{1}]$ -Beugungsbild für Typ-A NiSi_2 . Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen mit $[111]$ - bzw. $[\bar{1}11]$ -Zwillingsachsen führen zu Überlagerung mit zwei weiteren $[0\bar{1}1]$ -Mustern (Tab. A2), die so orientiert sind, daß die $[111]$ - bzw. $[11\bar{1}]$ -Richtungen für Typ-B NiSi_2 mit den $[111]$ - bzw. $[11\bar{1}]$ -Richtungen von Typ-A NiSi_2 übereinstimmen (Abb. A1 b,c). Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen mit den beiden übrigen Zwillingsachsen rufen keine zusätzlichen Reflexe hervor. Im allgemeinen kann auch nur ein Teil der in Abb. A2 eingezeichneten Reflexe gleichzeitig stark angeregt werden.

In $\langle 001 \rangle$ -Beugungsbildern rufen Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen keine Zusatzreflexe zu denen von Typ-A NiSi_2 hervor. Dies wird anhand eines $[010]$ -Beugungsbildes von Typ-A NiSi_2 in Abb. A2 gezeigt. Typ-B NiSi_2 -Ausscheidungen mit einer $[111]$ -Zwillingsachse sind in diesem Fall $[2\bar{1}2]$ -orientiert (Tab. A2), ihre $[10\bar{1}]$ -Richtung liegt parallel zur $[\bar{1}01]$ -Richtung von Typ-A NiSi_2 bzw. Si. Die Reflexe des $[2\bar{1}2]$ -Beugungsmusters kommen dann mit denen des Typ-A $[010]$ -Musters zur Deckung (Abb. A2 c).

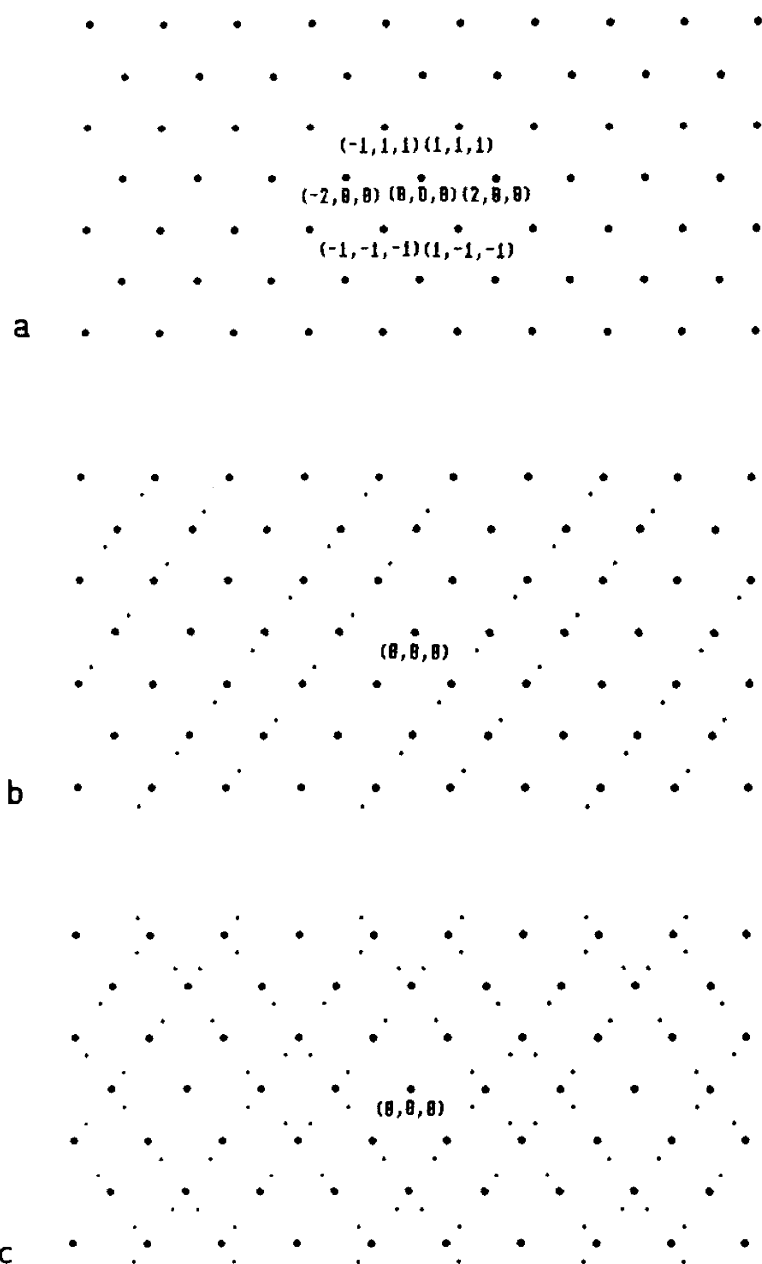


Abb. A1

(a) $[01\bar{1}]$ - Beugungsmuster für Typ-A NiSi_2 ; (b) Beugungsbild wie in (a), jedoch überlagert mit dem von Typ-B NiSi_2 mit einer $[111]$ -Zwillingsachse; (c) Beugungsmuster wie in (b), allerdings mit Zusatzreflexen von Typ-B NiSi_2 mit einer $[\bar{1}11]$ -Zwillingsachse.

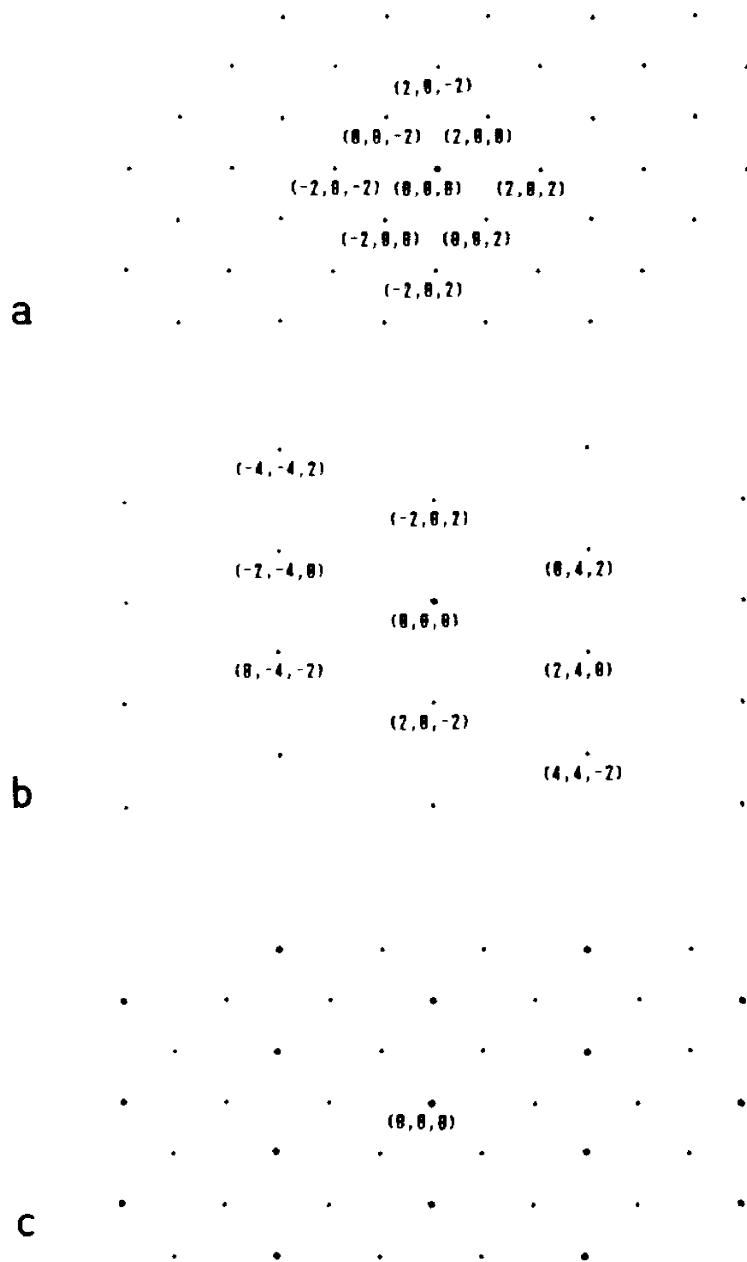


Abb. A2

(a) $[010]$ -Beugungsbild für Typ-A NiSi_2 ; (b) $[2\bar{1}2]$ -Beugungsmuster für Typ-B NiSi_2 mit einer $[111]$ -Zwillingsachse; (c) Überlagerung der Beugungsmuster .

D Aufspaltung von Beugungsreflexen

Die nadelförmige Intensitätsverteilung im reziproken Raum aufgrund von plättchenförmigen Ausscheidungen kann zu anscheinend aufgespaltenen Beugungsreflexen führen. Aus der Richtung $[p'q'r']$, unter der diese Aufspaltung zu beobachten ist, kann auf die Ausrichtung $[pqr]$ der Plättchennormalen im realen Raum zurückgeschlossen werden. Für kubische Kristalle gilt näherungsweise der Zusammenhang /181/

$$\begin{aligned}p' &= p(v^2 + w^2) - u(rw + qv) \\q' &= q(u^2 + w^2) - v(pu + rw) \\r' &= r(u^2 + v^2) - w(pu + qv) \quad ,\end{aligned}$$

wobei $[uvw]$ die vorliegende Zonenachse angibt.

E Tiefenskalen

Bei TEM-Analysen in Dunkelfeldtechnik wird durch eine Rotation der Probe im Probenhalter und eine Kippung mit Hilfe des TEM-Goniometers um eine zur Drehachse senkrechte Richtung eine Probenorientierung aufgesucht, in der der zur Abbildung ausgewählte Reflex angeregt ist. In XTEM-Untersuchungen kann die Verkippung der Probe zu einer Stauchung der Tiefenskala in der Projektion auf die Photoplatte führen, wenn die Kippachse nicht senkrecht zur Originalprobenoberfläche (Klebekante) steht. Kippungen um solche Achsen sind jedoch oft notwendig, um epitaktische NiSi_2 -Ausscheidungen im Dunkelfeld anzuregen, da dies nur unter bestimmten Orientierungen möglich ist.

Zur Bestimmung des Stauchungsfaktors wird ein Vektor $\vec{r}' = (x'', y'', z'')$ betrachtet, der sich durch Drehungen um Winkel φ (Drehung der Probe im Halter, $\varphi = 0$ für Klebekante parallel Goniometerachse) bzw. θ (Verkippen der Probe mit Hilfe des Goniometers) bezüglich der Achsen x bzw. y aus einem in der ungekippten cross-section Probe liegenden Ortsvektor $\vec{r} = (0, 0, z)$ ergibt (Abb. A3). Die Komponente z gibt z.B. den Abstand zur Proben-

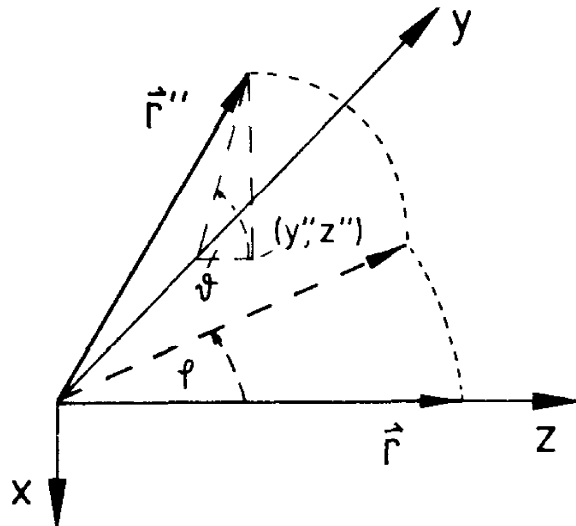


Abb. A3

Geometrie zur Herleitung des Stauchungsfaktors S .

oberfläche an. Den Vektor \vec{r}'' erhält man mit Hilfe zweier Drehmatrizen $\hat{D}_x(\varphi)$ und $\hat{D}_y(\vartheta)$ aus \vec{r} :

$$\vec{r}'' = \hat{D}_y(\vartheta) \hat{D}_x(\varphi) \vec{r}.$$

In der Projektion auf die y - z -Ebene verkürzt sich der Vektor \vec{r}'' zu $|\vec{r}_\perp''|$ gemäß

$$\begin{aligned} |\vec{r}_\perp''| &= (y''^2 + z''^2)^{1/2} \\ &= z \{ \cos^2(\varphi) \cos^2(\vartheta) + \sin^2(\varphi) \}^{1/2} \\ &=: z S^{-1}, \end{aligned}$$

wobei $S = S(\vartheta, \varphi)$ den Stauchungsfaktor angibt. Die angegebenen XTEM-Tiefenskalen wurden mit Hilfe dieser Stauchungsfunktion und geeichter Mikroskopvergrößerungen bestimmt.

Literaturverzeichnis

- /1/ J.F. Ziegler; Nucl. Instr. and Meth. **B6**, 270-282 (1985).
- /2/ D. Pramanik and A.N. Saxena; Nucl. Instr. and Meth. **B10/11**, 493-497 (1985).
- /3/ D.C. Ingram; Nucl. Instr. and Meth. **B12**, 161-169 (1985).
- /4/ A.F. Burenkov and F.F. Komarov; Sov. Phys. Tech. Phys. **33**, 334-338 (1988).
- /5/ K.J. Reeson; Nucl. Instr. and Meth. **B19/20**, 269-278 (1987).
- /6/ P.L.F. Hemment and K.J. Reeson; in: Physical Research Vol. 8: Energy Pulse and Particle Beam of Materials, ed. by K. Hennig (Akademie-Verlag, Berlin, 1988), p. 87-98.
- /7/ A.H. van Ommen; Nucl. Instr. and Meth. **B39**, 194-202 (1989).
- /8/ J. Belz; Dissertation, Universität Dortmund (1986).
- /9/ U. Bußmann; Dissertation, Universität Dortmund (1988).
- /10/ J. Götzlich; Phys. Bl. **44**, 391-395 (1988).
- /11/ G.H. Schwuttke and K. Brack; Transactions of the Metallurgical Society of AIME **245**, 475 (1969).
- /12/ C.W. Nieh, F. Xiong, C.C. Ahn, Z. Zhou, D.N. Jamieson, T. Vreeland, Jr., B. Fultz, and T.A. Tombrello; Mater. Res. Soc. Extended Abstracts, Silicon-on-Insulator and Buried Metals in Semiconductors, H2.5, 250 (1987).
- /13/ J.J. Grob, A. Grob, P. Thevenin, P. Siffert, A. Golanski, C. d'Anterroches; Materials Science and Engineering **B2**, 123 (1989).
- /14/ A.E. White, K.T. Short, J.L. Batstone, D.C. Jacobson, J.M. Poate, and K.W. West; Appl. Phys. Lett. **50**, 19-21 (1987).
- /15/ K.J. Reeson, P.L.F. Hemment, J. Stoemenos, J. Davis, and G.E. Celler; Appl. Phys. Lett. **51**, 2242-2244 (1987).
- /16/ K.N. Tu, E.I. Alessandrini, W.-K. Chu, H. Kräutle, and J.W. Mayer; Japan. J. Appl. Phys. **2**, 669-672 (1974).

- /17/ V.P. Salvi, S.V. Vidwans, A.A. Rangwala , B.M. Arora, Kuldeep, and A.K. Jain; Nucl. Instr. and Meth. B **28**, 242-246 (1987).
- /18/ S. Vidwans, V.P. Salvi A.A. Rangwala, B.M. Arora, A.K. Jain, and Kuldeep; Nucl. Instr. and Meth. B **39**, 280-283 (1989).
- /19/ F. Namavar, F.H. Sanchez, J.I. Budnick, A.H. Fasihuddin, and H.C. Hayden; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **74**, 487-492 (1987).
- /20/ F.H. Sanchez, F. Namavar, J.I. Budnick, A. Fasihudin and H.C. Hayden; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **51**, 439-444 (1986).
- /21/ G.J. Campisi, H.B. Dietrich, M. Delfino, and D.K. Sadana; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **54**, 747-752 (1986).
- /22/ V.Yu. Petukhov, I.B. Khaibullin, M.M. Zaripov, R. Groetzschel, M. Voelskow, and R. Klages; Phys. Stat. Sol. (a) **96**, 463-468 (1986).
- /23/ A.E. White, K.T. Short, R.C. Dynes, J.P. Garino, and J.M. Gibson; Appl. Phys. Lett. **50**, 95-97 (1987).
- /24/ A.E. White, K.T. Short, R.C. Dynes, J.P. Garino, and J.M. Gibson; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **74**, 481-486 (1987).
- /25/ A.E. White, K.T. Short, R.C. Dynes, J.P. Garino, and J.M. Gibson; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **93**, 93-97 (1987).
- /26/ J.C. Barbour, S.T. Picraux, and B.L. Doyle; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **107**, 269 (1988).
- /27/ P. Madakson, G.J. Clark, F.K. Legoues, F.M. d'Heurle, and J.E.E. Baglin; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **107**, 281-286 (1988).
- /28/ A.E. White, K.T. Short, R.C. Dynes, J.M. Gibson, and R. Hull; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **100**, 3 (1988).
- /29/ A.H. van Ommen, J.J.M. Ottenheim, A.M.L. Theunissen, and A.G. Mouwen; Appl. Phys. Lett. **53**, 669-671 (1988).
- /30/ K. Kohlhoff, S. Mantl, und B. Stritzker; Verhandl. DPG (VI) **23**, DS-6.1 (1988).
- /31/ A.E. White, K.T. Short, R.C. Dynes, R. Hull, and J.M. Vandenberg; Nucl. Instr. and Meth. **B39**, 253-258 (1989).

- /32/ K. Kohlhoff, S. Mantl, B. Stritzker, and W. Jäger; Nucl. Instr. and Meth. **B39**, 276-279 (1989).
- /33/ K. Kohlhoff, S. Mantl, B. Stritzker, and W. Jäger; Verhandl. DPG (VI) **24**, HL-3.6 (1989).
- /34/ C.W.T. Bulle-Lieuwma, A.H. van Ommen, L.J. van Ijzendoorn; Appl. Phys. Lett. **54**, 244-246 (1989).
- /35/ K.J. Reeson, A. de Veirmann, R. Gwilliam, C. Jeynes, B.J. Sealy, J. Landuyt, U. Bussmann, J.K.N. Lindner, and E.H. te Kaat; Materials Research Society Spring Meeting, San Diego (1989), angenommen zu Veröffentlichung in Mater. Res. Soc. Symp. Proc..
- /36/ J.F. Ziegler, J.P. Biersack, and U. Littmark; The Stopping and Range of Ions in Solids, in: The Stopping and Range of Ions in Matter, Vol. **1**, edited by J.F. Ziegler, (Pergamon Press, New York, 1985).
- /37/ G. Carter and W.A. Grant; in: Ionenimplantation in der Halbleitertechnik, (Carl Hanser Verlag, München, 1981).
- /38/ H.A. Bethe; Ann. Phys. **5**, 325 (1930).
- /39/ F. Bloch; Ann. Phys. **16**, 285 (1933).
- /40/ J.F. Ziegler; Nucl. Instr. and Meth. **168**, 17-24 (1980).
- /41/ U. Bußmann, Diplomarbeit Universität Dortmund (1984).
- /42/ U. Bussmann, N. Hecking, K.F. Heidemann and E. te Kaat; Nucl. Instr. and Meth. **B15**, 105-108 (1986).
- /43/ J. Lindhard, M. Scharff and H.E. Schiøtt; Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk **33**, No. 14, (1963).
- /44/ K.B. Winterbon, P. Sigmund and J.B. Sanders; Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk **37**, No. 14, (1970).
- /45/ H.J. Kang, E. Kawatoh and R. Shimizu; Jap. J. Appl. Phys. **23**, L262, (1984).
- /46/ Ref. /36/, p. 50-53.
- /47/ Das TRIM-Programm /36/ wurde von N. Hecking für diese Art der Darstellung modifiziert.

- /48/ A. Schönborn; Diplomarbeit Universität Dortmund (1986).
- /49/ A. Schönborn, N. Hecking and E. te Kaat; in: Physical Research Vol. **8**: Energy Pulse and Particle Beam Modifications of Materials, ed. by K. Hennig (Akademie-Verlag, Berlin, 1988) p. 511-513.
- /50/ A. Schönborn, N. Hecking and E. H. te Kaat; angenommen zur Veröffentlichung bei Nucl. Instr. and Meth. B.
- /51/ R. Car, P.J. Kelly, A. Oshiyama, and S.T. Pantelides; Phys. Rev. Lett. **52**, 1814 (1984).
- /52/ J.F. Gibbons; Proc. IEEE **60**, No. 9, 1062-1096 (1972).
- /53/ G.H. Kinchin, R.S. Pease; Rep. Progr. Phys. **18**, 1 (1955).
- /54/ K.F. Heidemann; Habilitationsschrift, Universität Dortmund (1982).
- /55/ F.L. Vook; in: Radiation Damage and Defects in Semiconductors, ed. by J.E. Whitehouse (The Institute of Physics, London 1973), p. 60-71.
- /56/ J.R. Dennis and E.B. Hale; Appl. Phys. Lett. **29**, 523 (1976).
- /57/ J. Narayan, D. Fathy, O.S. Oen, and O.W. Holland; J. Vac. Sci. Technol. **A2**, 1303 (1984).
- /58/ F.F. Morehead, Jr. and B.L. Crowder; Radiation Effects **6**, 27-32 (1970).
- /59/ J.R. Dennis and E.B. Hale; J. Appl. Phys. **49**, 1119-1127 (1978).
- /60/ R.P. Webb and G. Carter; Radiation Effects **59**, 69-76 (1981).
- /61/ E.C. Baranova, V.M. Gusev, Yu.V. Martynenko, C.V. Starinin and I.B. Haibullin; Radiation Effects **18**, 21 (1973).
- /62/ G.F. Cerofolini, L. Meda, and C. Volpones; J. Appl. Phys. **63**, 4911-4920 (1988).
- /63/ K.-W. Wang, W.G. Spitzer, G.K. Hubler, and D.K. Sadana; J. Appl. Phys. **58**, 4553-4564 (1985).
- /64/ N. Hecking; Diplomarbeit, Universität Dortmund (1982).

- /65/ K.F. Heidemann and H.F. Kappert; in: Defects and Radiation Effects in Semiconductors 1978, Conf. Ser. No. **46**, ed. by J.H. Albany (The Institute of Physics, London, 1979), p. 492-499.
- /66/ H.F. Kappert; Habilitationsschrift, Universität Dortmund (1980).
- /67/ H.-D. Eichholz; Diplomarbeit, Universität Dortmund (1978).
- /68/ H.F. Kappert, K.F. Heidemann, B. Grabe, and E. te Kaat; Phys. Stat. Sol. (a) **47**, 751-762 (1978).
- /69/ H.F. Kappert, N. Pfannkuche, K.F. Heidemann, and E. te Kaat, Radiation Effects **45**, 33-44 (1979).
- /70/ J. Belz; Diplomarbeit, Universität Dortmund (1982).
- /71/ J. Belz, K.F. Heidemann, H.F. Kappert, and E. te Kaat; Phys. Stat. Sol. (a) **76**, K81-K84 (1983).
- /72/ N. Hecking, K.F. Heidemann, and E. te Kaat; Nucl. Instr. and Meth. B **15**, 760-764 (1986).
- /73/ N. Hecking; Dissertation, Universität Dortmund (1989).
- /74/ S. Mader; in: Ion Implantation Science and Technology, ed. by J.F. Ziegler (Academic Press, Orlando, 1984), p. 109-138.
- /75/ J. Gyulai; *ibid.*, p. 139-210.
- /76/ K.S. Jones, S. Prussin, and E.R. Weber; Appl. Phys. A **45**, 1-34 (1988).
- /77/ P. Sigmund; Appl. Phys. Lett. **25**, 169-171 (1974).
- /78/ H.M. Naguib and R. Kelly; Radiation Effects, **25**, 1-12 (1975).
- /79/ G. Carter, D.G. Armour, S.E. Donnelly, and R. Webb; Radiation Effects **36**, 1-13 (1978).
- /80/ N. Hecking, and E. te Kaat; in: Physical Research Vol. **8**: Energy Pulse and Particle Beam Modification of Materials, ed. by K. Hennig (Akademie-Verlag, Berlin, 1988), p. 164-166.
- /81/ K. Julius; Diplomarbeit, Universität Dortmund (1982).
- /82/ U. Hilleringmann; Diplomarbeit, Universität Dortmund (1984).

- /83/ J. Lindner; Diplomarbeit, Universität Dortmund (1984).
- /84/ J.K.N. Lindner, N. Hecking, and E. te Kaat; Nucl. Instr. and Meth. **B26**, 551-556 (1987).
- /85/ C. Prunier, E. Ligeon, A. Bourret, A.C. Chami, and J.C. Oberlin; Nucl. Instr. and Meth. **B17**, 227-233 (1986).
- /86/ S.P. Murarka, in: Silicides for VLSI Applications (Academic Press, New York, 1983).
- /87/ G.W. Rubloff; Surface Science **132**, 268-314 (1983).
- /88/ K.N. Tu and J.W. Mayer, in: Thin Films - Interdiffusion and Reactions, ed. by J.M. Poate, K.N. Tu, and J.W. Mayer (Wiley, New York, 1978), p. 359.
- /89/ M.-A. Nicolet and S.S. Lau, in: VLSI Electronics: Microstructure Science, Vol. **6**, ed. by N.G. Einspruch and G.B. Larrabee (Academic Press, New York, 1983), Chap. 6.
- /90/ A. Ishizaka, P.A. Cullen, and Y. Shiraki; in: Extended Abstracts of the 16th International Conference on Solid State Devices and Materials, Kobe, (1984), pp. 39-42.
- /91/ S.P. Murarka; in: IEEE-IEDM 1979, Technical Digest (IEEE, New York, 1979), p. 454-457.
- /92/ M. Bartur and M.-A. Nicolet; IEEE Electron Device Letters,
- /93/ R.T. Tung, J.M. Poate, J.C. Bean, J.M. Gibson, and D.C. Jacobson; Thin Solid Films **93**, 77-90 (1982).
- /94/ F.M. d'Heurie and P. Gas; J. Mater. Res. **1**, 205-221 (1986).
- /95/ L. Schleicher, in: Landolt-Börnstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Vol. III/17c, ed. by M. Schulz and H. Weiss (Springer-Verlag, Berlin, 1984), pp. 593.
- /96/ M. Wittmer and K.N. Tu; Phys. Rev. B **29**, 2010-2020 (1984).
- /97/ A. Zur, T.C. McGill, and M.-A. Nicolet, J. Appl. Phys. **57**, 600-603 (1985).
- /98/ D.T. Hawkins; in: Metals Handbook, 8th edition, Vol. **8**, (American Society of Metals, Metals Park, Ohio, 1973) pp. 325.

- /99/ S.H. Chen, Z. Elgat, J.C. Barbour, L.R. Zheng, J.W. Mayer, and X.B. Carter; *Ultramicroscopy* **18**, 297-304 (1985).
- /100/ H. Föll, P.S. Ho, and K.N. Tu; *Phil. Mag. A* **45**, 31-47 (1982).
- /101/ F.M. d'Heurle, C.S. Petersson, J.E.E. Baglin, S.J. La Plaza, and C.Y. Wong; *J. Appl. Phys.* **55**, 4208-4218 (1984).
- /102/ R. Mattheis and D. Hesse; *Phys. Stat. Sol (a)* **109**, 217-229 (1988).
- /103/ G. Majni, M. Costado, and F. Panini; *Thin Solid Films* **125**, 71-78 (1985).
- /104/ J.O. Olowolafe, M.-A. Nicolet, and J.W. Mayer; *Thin Solid Films* **38**, 143-150 (1976).
- /105/ G. Majni, F. Della Valle, and C. Nobili; *J. Phys. D: Appl. Phys.* **17**, L77-L81 (1984).
- /106/ G. Majni, M. Costado, and F. Della Valle; *Il Nuovo Cimento* **4**, 27-38 (1984).
- /107/ J. Baglin, F. d'Heurle, and S. Petersson; in: Thin Film Interfaces and Interactions, ed. by J. Poate and J. Baglin (The Electrochemical Society, Princeton, NJ, 1980), p. 341-363.
- /108/ S.S. Lau and N.W. Cheung; *Thin Solid Films* **71**, 117-127 (1980).
- /109/ M. Mäenpää, L.S. Hung, M.-A. Nicolet, D.K. Sadana, and S.S. Lau; *Thin Solid Films* **87**, 277-284 (1982).
- /110/ M. Mäenpää, L.S. Hung, B.Y. Tsaur, J.W. Mayer, M.-A. Nicolet, S.S. Lau, D.K. Sadana, and W.F. Tseng; *J. Electronic Materials* **11**, 289-301 (1982).
- /111/ H. Ishiwara, K. Hikosaka, and S. Furukawa; *Appl. Phys. Lett.* **32**, 23-24 (1978).
- /112/ K. Hikosaka, H. Ishiwara, and S. Furukawa; *Radiation Effects* **51**, 253-256 (1980).
- /113/ B.-Y. Tsaur and C.H. Anderson, Jr.; *J. Appl. Phys.* **53**, 940-942 (1982).
- /114/ L.S. Wieluński, C.-D. Lien, B.X. Liu, and M.-A. Nicolet; *J. Vac. Sci. Technol.* **20**, 182-185 (1982).

- /115/ C.-D. Lien, M.-A. Nicolet, and P. Williams; Thin Solid Films **136**, 69-76 (1986).
- /116/ L. Wieluński, D.M. Scott, M.-A. Nicolet, and H. von Seefeld; Appl. Phys. Lett. **38**, 106-108 (1981).
- /117/ K.T. Ho, M.-A. Nicolet, and L. Wieluński; Thin Solid Films **104**, 243-250 (1983).
- /118/ S.P. Murarka, M.H. Read, C.J. Doherty, and D.B. Fraser; J. Electrochem. Soc. **129**, 293 (1982).
- /119/ A. Nylandsted Larsen, J. Chevallier, and G. Sørensen; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **23**, 727-732 (1984).
- /120/ R.E. Harper, C.J. Sofield, I.H. Wilson, and K.G. Stephens; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **37**, 573 (1985).
- /121/ C.-D. Lien, M.-A. Nicolet, and S.S. Lau; Phys. Stat. Sol. (a) **81**, 123-128 (1984).
- /122/ S.W. Lu, C.W. Nieh, and L.J. Chen; Appl. Phys. Lett. **49**, 1770-1772 (1986).
- /123/ R.T. Tung, J.M. Gibson, and J.M. Poate; Phys. Rev. Lett. **50**, 429-432 (1983).
- /124/ H. von Känel, T. Graf, J. Henz, M. Ospelt, and P. Wachter; J. Cryst. Growth **81**, 470-475 (1987).
- /125/ V. Hinkel, L. Sorba, H. Haak, K. Horn, and W. Braun; Appl. Phys. Lett. **50**, 1257-1259 (1987).
- /126/ P.A. Bennett, A.P. Johnson, and B.N. Halawith; Phys. Rev. B **37**, 4268-4271 (1988).
- /127/ P.A. Bennett, X. Tong, and J.R. Butler; J. Vac. Sci. Technol. B **6**, 1336-1340 (1988).
- /128/ P.J. Grunthaner, F.J. Grunthaner, and J.W. Mayer; J. Vac. Sci. Technol. **17**, 924-929 (1980).
- /129/ P.J. Grunthaner, F.J. Grunthaner, A. Madhukar, and J.W. Mayer; J. Vac. Sci. Technol. **19**, 649-656 (1981).

- /130/ N.W. Cheung, R.J. Culbertson, L.C. Feldman, P.J. Silverman, K.W. West, and J.W. Mayer; Phys. Rev. Lett. **45**, 120-124 (1980).
- /131/ N.W. Cheung and J.W. Mayer; Phys. Rev. Lett. **46**, 671-674 (1981).
- /132/ E.J. van Loenen, J.W.M. Frenken, and J.F. van der Veen; Appl. Phys. Lett. **45**, 41-43 (1984).
- /133/ A.E.M.J. Fischer, P.M.J. Maree, and J.F. van der Veen; Appl. Surf. Sci. **27**, 143-150 (1986).
- /134/ E.J. van Loenen; J. Vac. Sci. Technol. A **4**, 939-943 (1986).
- /135/ A. Franciosi, J.H. Weaver, D.G. O'Neill, Y.J. Chabal, J.E. Rowe, J.M. Poate, O. Bisi, and C. Calandra; J. Vac. Sci. Technol. **21**, 624-627 (1982).
- /136/ F. Comin, J.E. Rowe, and P.H. Citrin; Phys. Rev. Lett. **51**, 2402-2405 (1983).
- /137/ J.M. Gibson, J.L. Batstone, R.T. Tung, and F.C. Unterwald; Phys. Rev. Lett. **60**, 1158 - 1161 (1988).
- /138/ Y. Chang and J.L. Erskine; Phys. Rev. B **28**, 5766-5773 (1983).
- /139/ J.L. Erskine and Y. Chang; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **25**, 353-362 (1984).
- /140/ R.T. Tung and F. Schrey; zur Veröffentlichung eingereicht.
- /141/ R.T. Tung; J. Vac. Sci. Technol., (1989), in press.
- /142/ F. Föll, P.S. Ho, and K.N. Tu; J. Appl. Phys. **52**, 250-255 (1981).
- /143/ H. Föll, P.S. Ho, and K.N. Tu; Phil. Mag. A **45**, 31-47 (1982).
- /144/ R.T. Tung, J.M. Poate, J.C. Bean, J.M. Gibson, and D.C. Jacobson; Thin Solid Films **93**, 77-90 (1982).
- /145/ L.J. Chen, W.T. Lin, and M.B. Chang; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **25**, 447-452 (1984).
- /146/ D. Cherns, G.R. Anstis, J.L. Hutchison, and J.C.H. Spence;

- /147/ D. Cherns, J.C.D. Hetherington, and J.C. Humphreys; Phil. Mag. A **49**, 165-177 (1984).
- /148/ E.J. van Loenen, J.W.M. Frenken, J.F. van der Veen, and S. Valeri; Phys. Rev. Lett. **54**, 827-830 (1985).
- /149/ H. Fujitani and S. Asano; J. Phys. Soc. Japan **57**, 2253-2256 (1988).
- /150/ R.T. Tung; Phys. Rev. Lett. **52**, 461-464 (1984).
- /151/ J.M. Gibson, R.T. Tung, J.M. Phillips, and R. Hull; Journal de Physique, **C4**, 369-376 (1985).
- /152/ R.T. Tung, A.F.J. Levi, and J.M. Gibson; J. Vac. Sci. Technol. B **4**, 1435-1443 (1986).
- /153/ M. Ospelt, J. Henz, L. Flepp, and H. von Känel; Appl. Phys. Lett. **52**, 227-229 (1988).
- /154/ A. Kikuchi, T. Ohshima, and Y. Shiraki; J. Appl. Phys. **64**, 4614-4617 (1988).
- /155/ A. Ishizaka and Y. Shiraki; Jap. J. Appl. Phys. **23**, L499-L501 (1984).
- /156/ A. Ishizaka, P.A. Cullen, and Y. Shiraki; Extended Abstracts of the 16th Int. Conf. on Solid State Devices and Materials, Kobe (1984), pp. 39-42.
- /157/ R.T. Tung, J.M. Gibson, and A.F.J. Levi; Appl. Phys. Lett. **48**, 1264-1266 (1986).
- /158/ R.W. Fathauer, B.D. Hunt, L.J. Schowalter, M. Okamoto, and S. Hashimoto; Appl. Phys. Lett. **49**, 64-66 (1986).
- /159/ K.F. Heidemann; Phil. Mag. B **44**, 465-485 (1981).
- /160/ K.F. Heidemann; Radiat. Eff. **61**, 235-246 (1982).
- /161/ D.E. Aspnes, J.B. Theeten, and F. Hottier; Phys. Rev. Lett. B **20**, 3292-3302 (1979).
- /162/ R. Dolata; Diplomarbeit Universität Dortmund (1987).
- /163/ R. Dolata, J.K.N. Lindner and E.H. te Kaat; in Vorbereitung zur Veröffentlichung.

- /164/ R.G. Mazur and D.H. Dickey; J. Electrochem. Soc. **113**, 255 (1966).
- /165/ R. Holm; Electric Contacts (Springer-Verlag, Berlin, 1967).
- /166/ P.L.F. Hemment; in Ion Implantation: Science and Technology, ed. J.F. Ziegler, (Academic Press, Orlando, 1984), p. 211-260.
- /167/ L.J. van der Pauw; Philips Res. Repts. **13**, 1 (1958).
- /168/ L.B. Valdez; Proc. I.R.E. **42**, 420 (1954).
- /169/ P.A. Schumann, Jr., and E.E. Gardner; J. Elektrochem. Soc. **116**, 87-91 (1969).
- /170/ D. H. Dickey and J.R. Ehrstein; in: Semiconductor Measurement Technology: Spreading Resistance Analysis for Silicon Layers With Nonuniform Resistivity, (Nat. Bur. Stand. Spec. Publ. 400-48, Washington 1979).
- /171/ B. Mischke und H. Riemann; radio fernsehen elektronik **30**, 143-147 (1981).
- /172/ K. Müller; in: Springer Tracts in Modern Physics, Vol. **77**:
- /173/ D. Briggs and M.P. Seah; (eds.), in: Practical Surface Analysis, (John Wiley & Sons, Chichester, 1983).
- /174/ C.C. Chang; in Characterization of Solid Surfaces, ed. by P.F. Kane and G.B. Larrabee, (Plenum Press, New York, 1974), p. 509.
- /175/ M.P. Seah and W.A. Dench; Surf. Interface Anal. **1**, 2 (1979).
- /176/ A. Schönborn; Dissertation in Vorbereitung.
- /177/ S. Valeri, U. del Pennino, P. Sassaroli, and G. Ottaviani; Phys. Rev. B **28**, 4277-4283 (1983).
- /178/ Th. Wirth, V. Atzrodt, and H. Lange; Phys. Stat. Sol. (a) **82**, 459-466 (1984).
- /179/ M. Schmidt, E. te Kaat, H. Bubert, and R.P.H. Garten; Fresenius Z. Anal. Chem. **319**, 616-621 (1984).
- /180/ M. Schmidt; Diplomarbeit, Universität Dortmund (1984).

- /181/ P.B. Hirsch, A. Howie, R.B. Nicholson, D.W. Pashley and M.J. Whelan; Electron Microscopy of Thin Crystals; (Butterworths, London, 1971).
- /182/ Diffraction and Imaging Techniques in Material Science; ed. by S. Amelinckx, R. Gevers and J. van Landuyt, (North-Holland Publishing, Amsterdam, 1978).
- /183/ L. Reimer; in: Springer Series in Optical Sciences, Vol. **36**: Transmission Electron Microscopy; ed. by D.L. MacAdam, (Springer Verlag, Berlin, 1984).
- /184/ H.P. Karnthaler and E. Winter; Philips Bulletin EM **104**, 10 (1976).
- /185/ D.J.H. Cockayne; J. of Microscopy **98**, 116-134 (1973).
- /186/ J.K.N. Lindner, R. Domres, U. Bußmann, N. Koch, G. Ernst, U. Dretzler und E. te Kaat; Jahresbericht des Dynamitron-Tandem-Laboratoriums (1986), (DTL Universität Bochum, 1987), p. 80-81.
- /187/ J.F.M. Westendorp, P.K. RoI, S. Doorn, H. Kersten, J. ter Beek, J. Derks, F.W. Saris, R. Koudijs, and W.J. Kilsdonk; Nucl. Instr. and Meth. B**17**, 66-72 (1986).
- /188/ E. Mihatsch; Staatsexamensarbeit Universität Dortmund (1975).
- /189/ G.R. Booker and R. Stickler; Brit. J. of Appl. Phys. **13**, 446 (1962).
- /190/ A. Titze; Diplomarbeit Universität Dortmund (1987).
- /191/ D. Borchert; Diplomarbeit Universität Dortmund (1988).
- /192/ T. Klassen; Diplomarbeit Universität Dortmund, in Vorbereitung.
- /193/ R. Domres; Diplomarbeit, Universität Dortmund (1988).
- /194/ J.K.N. Lindner, R. Domres, and E.H. te Kaat; Nucl. Instr. and Meth. B**39**, 306-310 (1989).
- /195/ L. Csepregi, E.F. Kennedy, T.J. Gallagher, J.W. Mayer, and T.W. Sigmon; J. Appl. Phys. **48**, 4234-4240 (1977).
- /196/ J.S. Williams; Nucl. Instr. and Meth. **209/210**, 219-228 (1983).
- /197/ I.F. Bubb, D.J. Chivers, J.R. Liu, A.P. Pogany, K.T. Short, H.K. Wagenfeld, and J.S. Williams; Nucl. Instr. and Meth. B**2**, 761-765 (1984).

- /198/ E.F. Kennedy, L. Csepregi, J.W. Mayer and T.W. Sigmon;
J. Appl. Phys. **48**, 4241-4246 (1977).
- /199/ J.S. Williams, C.E. Christodoulides, and W.A. Grant;
Radiation Effects **48**, 157-160 (1980).
- /200/ G. Della Mea, A.V. Drigo, P. Mazzoldi, G. Nardelli, and R. Zannoni;
Appl. Phys. Lett. **16**, 382-383 (1970).
- /201/ I.G. Salisbury and M.H. Loretto; Radiation Effects **59**, 59-68 (1981).
- /202/ R.G. Elliman, J.S. Williams, S.T. Johnson, and A.P. Pogany;
Nucl. Instr. and Meth. B**15**, 439-442 (1986).
- /203/ Z. Lilliental, R.W. Carpenter, and J.C. Kelly; Thin Solid Films **138**,
141-150 (1986).
- /204/ O.W. Holland, M.K. El-Ghor, and C.W. White; Appl. Phys. Lett. **53**,
1282-1284 (1988).
- /205/ K.N. Tu; Appl. Phys. Lett. **27**, 221-224 (1975).
- /206/ G.L.P. Berning and L.L. Levenson, Thin Solid Films **55**, 473 (1978).
- /207/ L. Csepregi, E.F. Kennedy, J.W. Mayer, and T. Sigmon;
J. Appl. Phys. **49**, 3906 (1978).
- /208/ J.S. Kang and D.K. Schroder; J. Appl. Phys. **65**, 2974-2985 (1989).
- /209/ T.M. Buck, K.A. Pickar, J.M. Poate, and C.-M. Hsieh;
Appl. Phys. Lett. **21**, 485-487 (1972).
- /210/ T.M. Buck, J.M. Poate, K.A. Pickar, and C.-M. Hsieh;
Surface Science **35**, 362-379 (1973).
- /211/ D.M. Lee, J.B. Posthill, F. Shimura, and G.A. Rozgonyi;
Appl. Phys. Lett. **53**, 370-372 (1988).
- /212/ J.P. Hirth and J. Lothe; Theory of Dislocations, (McGraw-Hill,
New York, 1968).
- /213/ M.K. Bakhadyrkhanov, S. Zainabidinov, and A. Khamidov;
Sov. Phys. Semicond. **14**, 412 (1980).
- /214/ V. Yu. Petukhov, I.B. Khaibullin, and M.M. Zaripov; Phys. Chem.
Mech. Surfaces **4**, 522-529 (1986).

- /215/ V. Yu. Petukhov, I.B. Khaibullin, M.M. Zaripov, E. Wieser, and R. Groetzschel; in: Physical Research Vol. **8**: Energy Pulse and Particle Beam Modification of Materials, ed. by K. Hennig (Akademie Verlag, Berlin, 1988) p. 341-343.
- /216/ P.D. Augustus; in: Inst. Phys. Conf. Ser. **67**: Proc. Conf. Micr. Semicond. Mat. III, (The Institute of Physics, London, 1983), p. 229-234.
- /217/ M. Seibt and K. Graff; Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **104**, 215-218 (1988).
- /218/ M. Seibt; Dissertation, Universität Göttingen (1986).
- /219/ N.A. Stolwijk, J. Hölzl, W. Frank, E.R. Weber, and H. Mehrer; Appl. Phys. **A39**, 37 (1986).
- /220/ R. Heiermann; Diplomarbeit, Universität Dortmund, in Vorbereitung.
- /221/ R.D. Frampton, E.A. Irene, and F.M. d'Heurle; J. Appl. Phys. **59**, 978-980 (1986).
- /222/ A. Schönborn, H. Bubert, und E.H. te Kaat; Verhandl. DPG (VI)**24**, HL 3.9 (1989).
- /223/ Y. Sorimachi, H. Ishiwara, H. Yamamoto, and S. Furukawa; Jap. J. Appl. Phys. **21**, 752-756 (1982).
- /224/ E.R. Weber; Appl. Phys. **A30**, 1-22 (1983).
- /225/ M. Yoshida, Y. Yamaguchi, and H. Aoki; J. Phys. Soc. Japan **17**, 1676-1677 (1962).
- /226/ C. Picker and P.S. Dobson; Crystal Lattice Defects **3**, 219-222 (1972).
- /227/ G. Sauthoff; in: Grundlagen der Wärmebehandlung von Stahl, ed. by W. Pitsch (Verlag Stahleisen, Düsseldorf, 1976), p. 43-55.

Telle dieser Arbeit wurden bereits vorgestellt:

6 MeV Nickelimplantation in Silizium;

J.K.N. Lindner und E. te Kaat;

Verhandl. DPG (VI) **22**, HL-25.3 (1987).

6 MeV Ni High Dose Implantation into Silicon;

J.K.N. Lindner and E.H. te Kaat;

International Workshop on High Energy Ion Implantation into Semiconductors and Superconductors, Boston, Massachusetts, USA (1987).

6 MeV Ni High Dose Implantation into Silicon;

J.K.N. Lindner and E. te Kaat;

Physical Research Vol. **8**: Energy Pulse and Particle Beam Modification of Materials, ed. by K. Hennig (Akademie-Verlag, Berlin, 1988) p.155-157.

Tief vergrabene metallische Schichten durch 6 MeV Nickel-Hochdosisimplantation in Silizium;

J. K.N. Lindner und E.H. te Kaat;

Verhandl. DPG (VI) **23**, HL-16.2 (1988).

Strahlenschäden in Silizium nach 6 MeV Ni-Implantation;

R. Domres, J.K.N. Lindner und E.H. te Kaat;

Verhandl. DPG (VI) **23**, HL-11.34 (1988).

NiSi₂-Formation by 6 MeV High Dose Nickel Implantation into Silicon;

J.K.N. Lindner and E.H. te Kaat;

Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **107**, 275-280 (1988).

Synthesis of NiSi₂ by 6 MeV Ni-Implantation into Silicon;

J.K.N. Lindner and E.H. te Kaat;

J. Mater. Res. **3**, 1238-1246 (1988).

NiSi₂-Schichtsynthese durch 6 MeV Ni-Implantation in Si und Tempern;

J.K.N. Lindner und E.H. te Kaat;

Verhandl. DPG (VI) **24**, HL- 3.8 (1989).

Lattice Damage and Silicide Formation by Deep Implantations into Silicon;

E.H. te Kaat, N. Hecking and J.K.N. Lindner;

Materials Science and Engineering **B2**, 145-156 (1989).

AES and SIMS profiling of buried silicide layers formed by 6 MeV high dose nickel implantation into silicon;

A. Schönborn, J.K.N. Lindner, E.H. te Kaat, H. Bubert,

M. Grasserbauer and G. Friedbacher;

Fresenius Z. Anal. Chem. **333**, 511-515 (1989).

Radiation Damage and Amorphization of Silicon by 6 MeV Ni Ion Implantation;

J.K.N. Lindner, R. Domres and E.H. te Kaat;

Nucl. Instr. and Meth. **B39**, 306-310 (1989).

6 MeV Ni Implantation into Silicon;

J.K.N. Lindner and E.H. te Kaat;

Symposium on Ion Beam Modification of Materials of the American Vacuum Society, Murray Hill, New Jersey, USA (1989).

6 MeV Ni Implantation into Silicon;

J.K.N. Lindner and E.H. te Kaat;

Seminar of the Dept. for Materials Science and Engineering, Cornell University, Ithaca, New York, USA (1989).

Dank

Diese Arbeit wurde am Lehrstuhl für Experimentelle Physik I der Universität Dortmund durchgeführt.

Herrn Prof. Dr. Erich H. te Kaat danke ich für die Möglichkeit zur Durchführung der Untersuchungen, seine stete Diskussionsbereitschaft und sein förderndes Interesse an meiner Arbeit.

Besonders danken möchte ich Herrn Dipl. Phys. Ralf Domres, Herrn Dr. Norbert Hecking, Herrn cand. phys. Thomas Klassen und Herrn Dipl. Phys. Andreas Schönborn für das große Engagement bei gemeinsamen Untersuchungen, für zahlreiche, anregende Diskussionen und für die ständige Hilfsbereitschaft.

Die tatkräftige Unterstützung durch Ralf Domres sowie der stete Gedankenaustausch mit Norbert Hecking haben in großem Maße die Untersuchung der Strahlenschädigung gefördert. Ebenfalls hervorheben möchte ich die ausgezeichnete Zusammenarbeit – besonders bei den Temperexperimenten – mit Andreas Schönborn und Thomas Klassen.

Ihm sowie Herrn Dipl. Phys. Dietmar Borchert und Herrn Dipl. Phys. Andreas Titze danke ich für die Präparation der cross-section Proben.

Herrn Dipl. Phys. Ralf Dolata gilt besonderer Dank für die Zusammenarbeit beim Aufbau der Apparatur zur Messung von Ausbreitungswiderständen. Ich danke ihm und Herrn cand. phys. Ralf Heiermann sehr für die Überlassung einiger Widerstandsmessungen.

Gern erinnere ich mich an die langjährige Zusammenarbeit mit Dr. Udo Bußmann, der oft durch fachlichen und freundschaftlichen Rat zu helfen wußte. Ihm sei recht herzlich gedankt.

Den Mitarbeitern des Dynamitron-Tandem-Laboratoriums in Bochum unter der Leitung von Herrn Dipl. Phys. K. Brand danke ich für Ihren großen Einsatz hinsichtlich der für die Implantationen erforderlichen hohen Strahlqualität und für die tatkräftige Unterstützung bei experimentellen Problemen. Allen, die bei den zahlreichen und langdauernden Strahlzeiten mitgeholfen haben, sei an dieser Stelle herzlich gedankt.

Herrn Dr. Reiner Ramlau und allen weiteren Lehrstuhl- und Institutsangehörigen danke ich für die gute Zusammenarbeit und das freundliche Arbeitsklima.